



Full wwPDB EM Validation Report ⓘ

Nov 20, 2022 – 05:05 am GMT

PDB ID : 6H3J
EMDB ID : EMD-0134
Title : Structural snapshots of the Type 9 protein translocon Plug-complex
Authors : Deme, J.C.; Lea, S.M.
Deposited on : 2018-07-18
Resolution : 3.70 Å (reported)

This is a Full wwPDB EM Validation Report for a publicly released PDB entry.

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org

A user guide is available at

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/EMValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

<http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types>.

The following versions of software and data (see [references ⓘ](#)) were used in the production of this report:

EMDB validation analysis : 0.0.1.dev43
MolProbity : 4.02b-467
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
MapQ : 1.9.9
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.31.2

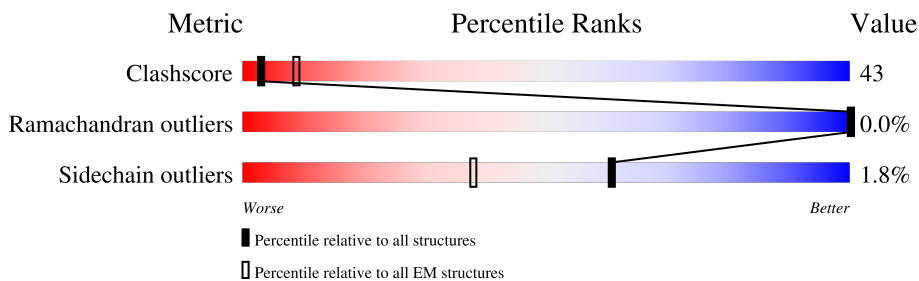
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

ELECTRON MICROSCOPY

The reported resolution of this entry is 3.70 Å.

Percentile scores (ranging between 0-100) for global validation metrics of the entry are shown in the following graphic. The table shows the number of entries on which the scores are based.



Metric	Whole archive (#Entries)	EM structures (#Entries)
Clashscore	158937	4297
Ramachandran outliers	154571	4023
Sidechain outliers	154315	3826

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the map. The red, orange, yellow and green segments of the bar indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria respectively. A grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions $\leq 5\%$. The upper red bar (where present) indicates the fraction of residues that have poor fit to the EM map (all-atom inclusion $< 40\%$). The numeric value is given above the bar.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	2403	
2	B	176	
3	C	419	

2 Entry composition

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 20301 atoms, of which 212 are hydrogens and 0 are deuteriums.

In the tables below, the AltConf column contains the number of residues with at least one atom in alternate conformation and the Trace column contains the number of residues modelled with at most 2 atoms.

- Molecule 1 is a protein called Protein involved in gliding motility SprA.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S		
1	A	1988	15853	10006	2690	3116	41	0	0

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1114	THR	ALA	conflict	UNP A0A1M5G5I4

- Molecule 2 is a protein called Peptidyl-prolyl cis-trans isomerase.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
			Total	C	H	N	O		
2	B	126	1185	624	212	158	191	0	0

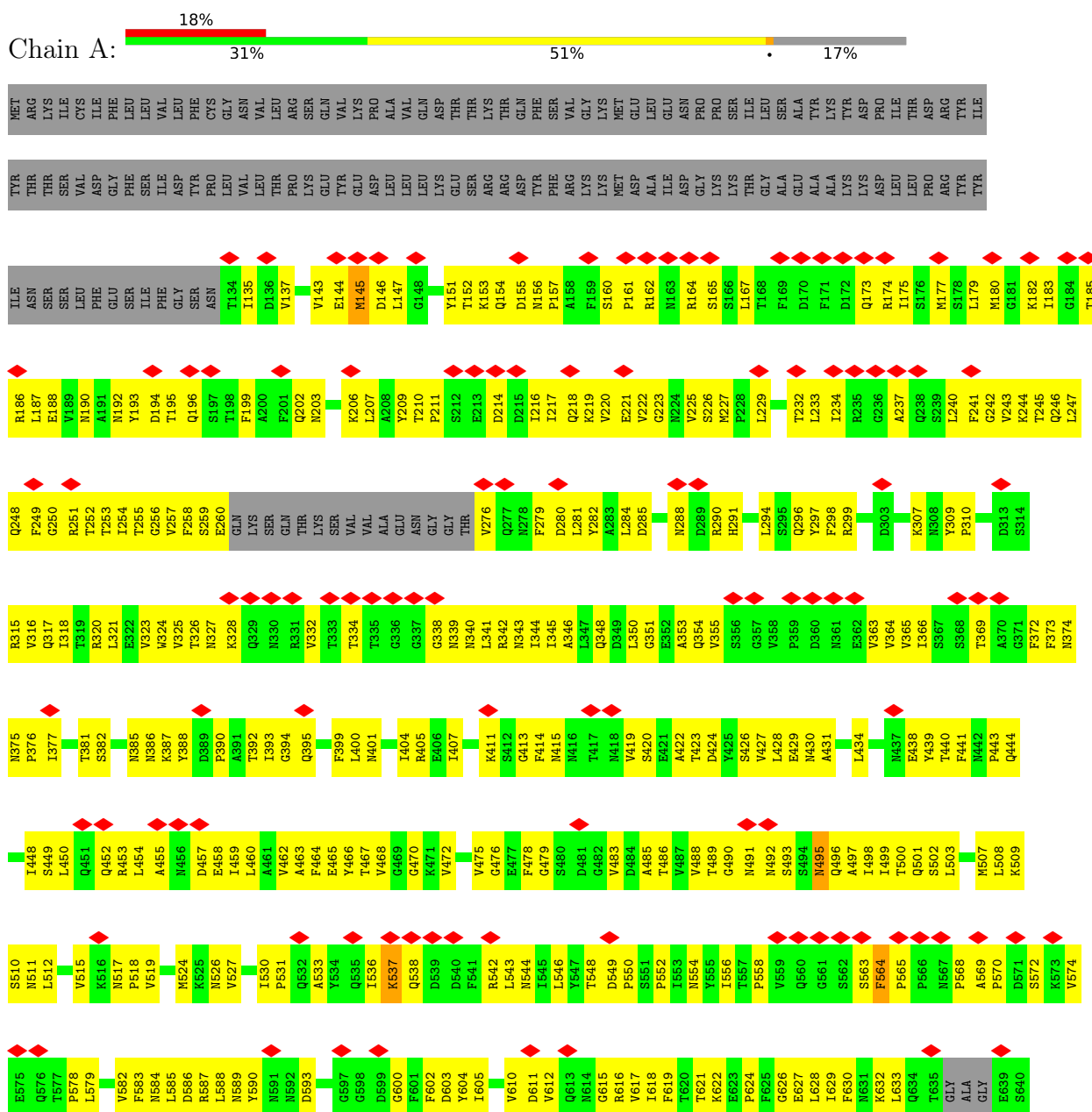
- Molecule 3 is a protein called Plug.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S		
3	C	397	3263	2085	541	631	6	0	0

3 Residue-property plots

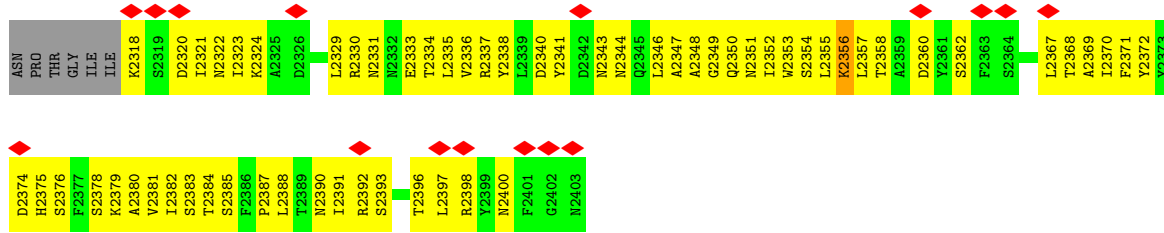
These plots are drawn for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic for a chain summarises the proportions of the various outlier classes displayed in the second graphic. The second graphic shows the sequence view annotated by issues in geometry and atom inclusion in map density. Residues are color-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. A red diamond above a residue indicates a poor fit to the EM map for this residue (all-atom inclusion < 40%). Stretches of 2 or more consecutive residues without any outlier are shown as a green connector. Residues present in the sample, but not in the model, are shown in grey.

- Molecule 1: Protein involved in gliding motility SprA

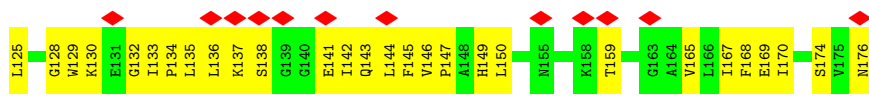
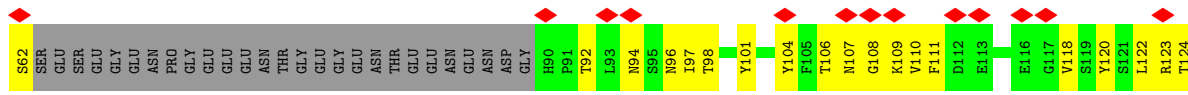
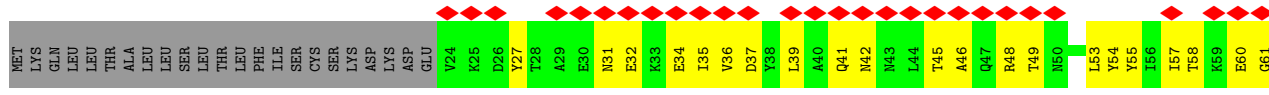


Y641	T645	M648	A649	M650	Q651	Y654	Y655	F656	R657	M658	M659	Y660	R661	M662	T663	Q664	A665	G666	A667	L668	Q669	D670	S671	D672	K673	M674	L677	L678	R679	G680	K681	Y682	K683	SER	SER	GLY	SER	SER	ASN	GLY	ILE	PRO	ILE	ILE	ALA	PHE	ALA	ASN	ASN	VAL	VAL	PRO	GLN	GLN	GLY	SER	VAL	VAL	VAL	THR							
ALA	ALA	GLY	ARG	VAL	LEU	VAL	GLU	GLY	ILE	ASP	TYR	SER	SER	VAL	ASP	THR	PRO	GLN	LYS	LEU	GLY	ARG	VAL	VAL	GLN	ILE	ILE	THR	PRO	PRO	GLU	GLN	SER	LEU	GLN	ALA	ALA	SER	ASN	ASN	SER	SER	ILE	PHE	GLY	GLN	GLN	T754	R755	R756	F760	N761	VAL	P821	I762	E763	H764	S822	D824	T825	D826	V827	P828	S829			
D768	K769	F770	V771	I772	G773	E836	G774	T775	Y776	L777	K778	M779	T780	I781	R782	PRO	PHE	THR	GLN	THR	GLN	LYS	ASP	ARG	VAL	GLN	ILE	THR	GLY	GLU	ALA	THR	SER	LEU	SER	V795	I799	F800	G801	N802	N803	N804	N805	Y806	S807	T808	E809	V810	P811	F812	L813	T814	R815	L816	A817	N818	R819	L820	P821	F822	M823	N824	T825	D826	V827	P828	S829
N830	L831	S832	I833	R834	G835	E836	V837	A838	F839	L840	R841	P842	ASP	ALA	PRO	LYS	ALA	SER	ASP	PHE	PHE	GLN	GLN	GLY	GLU	ALA	THR	I855	Y857	V858	D859	F860	F861	E862	G863	S864	Q865	S866	T867	L868	I869	S870	R871	S872	A873	Y874	A875	M876	A879	S880	T881	P882	F883	I884	T885	D886	S886	I887	N888	D889	N890						
T891	F892	N893	A894	N895	S896	N897	T898	L899	E900	Y901	F903	K904	R905	A906	K907	L908	S909	N910	Y911	T912	Y913	D914	P915	V916	F917	Y918	S919	S920	K921	P922	S923	G924	I925	S926	N927	D928	D929	L930	S931	L932	N933	R937	I938	Y939	S940	R941	E942	L943	N946	THR	ASP	ILE	ALA	GLN	GLY	GLN											
ILE	Q955	T959	L960	D961	L962	T963	Y964	K965	P966	G967	R969	G970	P971	Y972	N973	N974	S977	F978	G979	A980	S981	N982	P983	N986	P987	G988	G989	I990	M991	R992	A993	L994	N995	F999	E1000	Q1001	G1002	M1003	V1004	E1005	Y1006	I1007	Q1008	F1009	W1010	W1011	L1012	L1013	P1014	Y1015	V1016	G1017	M1018	G1019													
E1020	A1023	T1024	M1025	A1026	G1027	H1028	Y1030	F1031	M1032	L1033	G1034	E1035	L1036	S1037	D1039	V1040	L1041	K1042	L1043	G1044	R1045	Q1046	Q1047	Y1048	E1049	H1050	G1051	L1052	G1053	P1054	D1055	Q1056	V1057	M1058	V1059	M1060	P1061	Q1062	P1063	L1064	W1065	D1067	V1068	P1069	S1073	L1074	I1075	A1077	F1078	D1079	T1080	M1081	P1082														
D1083	N1084	K1085	K1086	N1087	V1090	G1091	L1092	D1093	G1094	L1095	P1096	S1097	E1100	I1103	N1106	A1108	G1109	E1110	A1111	ASP	PRO	I1114	G1115	D1116	D1117	T1119	Y1120	Y1121	L1122	N1123	A1124	D1125	V1128	L1129	E1130	R1131	M1134	Y1135	N1136	G1137	T1138	E1139	G1140	N1141	V1144	S1145	I1146	N1147	P1149																		
M1150	R1151	G1152	S1153	L1156	P1157	D1158	V1159	E1160	D1161	I1162	M1163	R1164	D1165	M1166	T1167	M1168	S1169	T1170	I1171	M1172	A1173	Y1174	E1175	Y1177	S1178	I1179	D1180	V1181	K1182	P1183	G1184	M1185	Q1186	V1187	G1188	E1189	M1190	Y1191	I1192	T1193	D1194	I1195	R1196	E1197	V1198	T1199	M1200	V1201	D1202	L1203	P1204	M1205	G1206	G1207	T1208	T1209	M1210										
A1211	R1212	W1213	I1214	Q1215	F1216	K1217	L1218	P1219	V1220	S1221	E1222	P1223	Q1224	M1225	T1226	I1227	G1228	M1229	I1230	T1231	D1232	F1233	R1234	S1235	L1236	R1237	F1238	M1239	R1240	M1241	F1242	M1243	T1244	G1245	F1246	Q1249	M1250	T1251	V1252	R1253	F1254	G1255	A1256	L1257	D1258	L1259	V1260	R1261	W1264	Y1267	THR	GLY	THR	THR	ASP	ALA											
ASN	ASP	GLN	ASN	PRO	ASP	ASP	ASP	GLY	V1283	E1284	F1285	D1286	V1287	A1288	L1289	V1290	N1291	I1292	Q1293	E1294	N1295	K1298	Q1299	P1300	Y1303	P1306	P1307	G1308	V1309	Q1310	ARG	GLU	GLN	LEU	TYR	ASN	ASN	ASN	THR	VAL	ILE	ASN	GLN	ASN	E1325	Q1326	A1327	L1328	V1330	R1331	I1332	G1333	A1334	I1335	G1336												
L1337	Q1338	Y1339	Q1340	D1341	S1342	R1343	A1344	V1345	F1346	K1347	N1348	V1349	S1350	L1351	V1352	M1353	Y1356	K1357	K1358	L1359	K1360	M1361	F1362	L1363	H1364	A1365	E1366	S1367	L1368	P1369	M1370	Q1371	P1372	T1373	L1374	E1375	D1376	D1377	E1378	M1379	V1380	I1383	R1384	F1385	F1389	T1390	Q1391	F1392	V1393	A1394	Q1395	I1398	P1399	L1400	K1401												
V1402	T1403	K1404	T1405	G1406	G1407	S1408	C1409	S1410	I1411	S1412	P1413	D1414	L1415	V1416	W1417	M1418	D1419	D1420	M1421	D1424	L1425	A1426	L1427	D1428	L1429	L1430	T1431	R1432	M1433	K1434	I1435	K1436	A1437	M1438	S1439	I1440	D1441	I1442	M1443	S1444	S1445	K1446	R1447	D1448	V1449	M1450	G1451	I1452	Y1453	M1457	D1458	P1459	ASP	LEU	GLU	GLY	GLY										

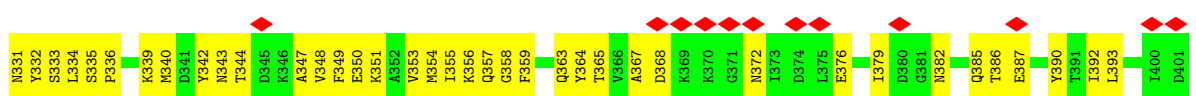
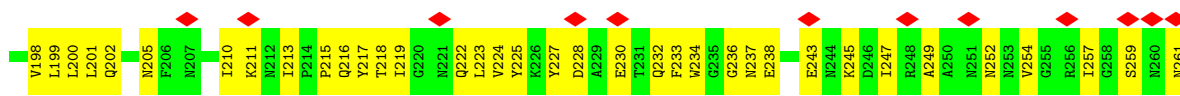
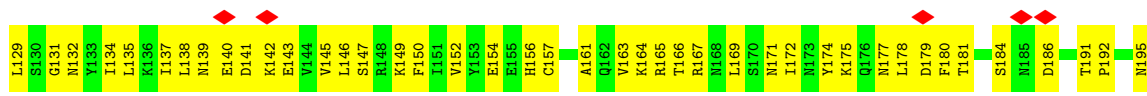
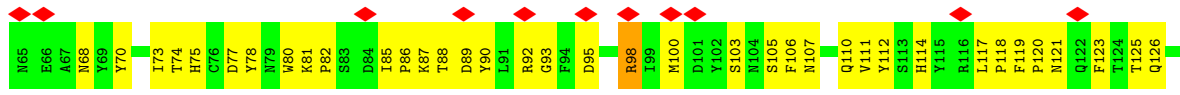
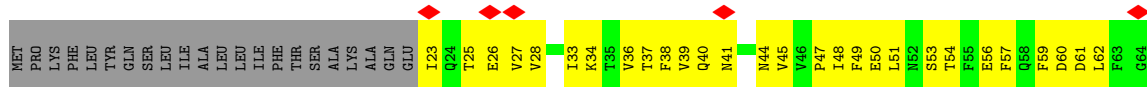
P2251	L2252	I2253	R2254	N2255	D2256	F2257	E2258	L2259	K2260	S2261	S2262	L2263	Q2203	R2264	V2265	S2267	E2268	K2270	K2271	D2272	L2275	S2276	M2277	F2278	F2279	D2280	N2281	N2282	L2283	L2284	S2285	E2286	V2287	K2288	G2289	M2290	E2291	Y2292	L2293	L2294	G2295	L2296	G2297	Y2298	R2299	F2300	K2301	D2302	VAL	ILE	PHE	SER	SER	SER	ARG	LEU	ALA	ASP																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																												
D2195	K2196	F2197	K2198	R2199	F2200	S2201	L2202	Q2203	R2204	N2205	Y2206	R2207	A2208	S2209	Y2210	T2211	I2212	N2213	F2215	R2216	S2217	N2218	F2219	D2220	Y2221	N2222	S2223	S2224	P2225	K2226	D2229	N2230	T2232	N2233	F2234	Y2235	N2236	E2237	I2238	I2239	M2240	S2241	N2242	V2243	N2244	L2245	V2246	E2247	Q2248	F2249	S2250																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																			
T2122	P2123	A2124	E2125	T2126	D2127	P2128	N2129	Y2130	A2131	V2132	T2133	T2134	A2135	N2136	Q2137	G2138	Y2139	P2140	I2141	G2142	Y2143	T2144	K2145	S2146	N2147	Q2148	K2149	V2150	L2151	L2152	P2153	A2154	F2155	L2156	A2157	A2158	S2167	S2168	T2169	N2170	L2171	F2172	R2173	P2176	L2177	P2178	M2179	N2180	L2182	K2183	Y2184	N2185	G2186	L2187	M2188	R2189																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
R2040	T2041	S2042	E2043	Q2044	Y2045	S2046	V2047	D2048	P2049	S2050	L2051	N2052	E2053	P2056	L2057	Y2060	T2061	Y2062	G2063	M2064	F2065	S2066	L2067	S2068	T2069	M2071	P2078	S2079	D2080	E2081	T2082	Q2083	S2084	F2087	F2090	R2091	R2094	L2095	R2100	A2111	I2112	P2113	R2114	Y2115	G2116	D2117	A2118	N2119	N2120	P2121																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
G1988	F1989	G1970	G1971	T1972	S1973	P1974	T1975	S1976	L1977	G1978	F1979	V1980	F1981	G1982	S1983	Q1984	D1985	D1986	V1987	M1996	L1997	L1998	T1999	Y2000	Q2001	D2002	F2003	F2007	T2008	Q2009	Y2010	S2011	K2016	V2017	N2020	T2021	D2022	L2023	L2024	P2025	D2026	L2027	K2028	V2029	T1958	V1959	L2031	S2032	M2033	G1962	Y1963	T1964	R2035	S2036	Y2037	S2038	E2039																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																													
I1836	F1837	G1838	F1839	K1841	A1842	T1847	Y1850	M1851	W1852	K1853	L1854	S1855	T1857	S1860	E1861	Y1862	E1863	L1864	R1865	N1866	G1867	D1871	L1872	G1873	M1874	T1875	L1876	S1879	M1880	S1881	T1882	L1883	T1885	L1887	L1888	M1889	T1892	LEU	TYR	LYS	LYS	TYR	TYR	L2828	L2829	L2830	L2831	L2832	L2833	L2834	L2835	L2836	L2837	L2838	L2839	L2840	L2841	L2842	L2843	L2844	L2845	L2846	L2847	L2848	L2849	L2850	L2851	L2852	L2853	L2854	L2855	L2856	L2857	L2858	L2859	L2860	L2861	L2862	L2863	L2864	L2865	L2866	L2867	L2868	L2869	L2870	L2871	L2872	L2873	L2874	L2875	L2876	L2877	L2878	L2879	L2880	L2881	L2882	L2883	L2884	L2885	L2886	L2887	L2888	L2889	L2890	L2891	L2892	L2893	L2894	L2895	L2896	L2897	L2898	L2899	L2900	L2901	L2902	L2903	L2904	L2905	L2906	L2907	L2908	L2909	L2910	L2911	L2912	L2913	L2914	L2915	L2916	L2917	L2918	L2919	L2920	L2921	L2922	L2923	L2924	L2925	L2926	L2927	L2928	L2929	L2930	L2931	L2932	L2933	L2934	L2935	L2936	L2937	L2938	L2939	L2940	L2941	L2942	L2943	L2944	L2945	L2946	L2947	L2948	L2949	L2950	L2951	L2952	L2953	L2954	L2955	L2956	L2957	L2958	L2959	L2960	L2961	L2962	L2963	L2964	L2965	L2966	L2967	L2968	L2969	L2970	L2971	L2972	L2973	L2974	L2975	L2976	L2977	L2978	L2979	L2980	L2981	L2982	L2983	L2984	L2985	L2986	L2987	L2988	L2989	L2990	L2991	L2992	L2993	L2994	L2995	L2996	L2997	L2998	L2999	L3000	L3001	L3002	L3003	L3004	L3005	L3006	L3007	L3008	L3009	L3010	L3011	L3012	L3013	L3014	L3015	L3016	L3017	L3018	L3019	L3020	L3021	L3022	L3023	L3024	L3025	L3026	L3027	L3028	L3029	L3030	L3031	L3032	L3033	L3034	L3035	L3036	L3037	L3038	L3039	L3040	L3041	L3042	L3043	L3044	L3045	L3046	L3047	L3048	L3049	L3050	L3051	L3052	L3053	L3054	L3055	L3056	L3057	L3058	L3059	L3060	L3061	L3062	L3063	L3064	L3065	L3066	L3067	L3068	L3069	L3070	L3071	L3072	L3073	L3074	L3075	L3076	L3077	L3078	L3079	L3080	L3081	L3082	L3083	L3084	L3085	L3086	L3087	L3088	L3089	L3090	L3091	L3092	L3093	L3094	L3095	L3096	L3097	L3098	L3099	L3100	L3101	L3102	L3103	L3104	L3105	L3106	L3107	L3108	L3109	L3110	L3111	L3112	L3113	L3114	L3115	L3116	L3117	L3118	L3119	L3120	L3121	L3122	L3123	L3124	L3125	L3126	L3127	L3128	L3129	L3130	L3131	L3132	L3133	L3134	L3135	L3136	L3137	L3138	L3139	L3140	L3141	L3142	L3143	L3144	L3145	L3146	L3147	L3148	L3149	L3150	L3151	L3152	L3153	L3154	L3155	L3156	L3157	L3158	L3159	L3160	L3161	L3162	L3163	L3164	L3165	L3166	L3167	L3168	L3169	L3170	L3171	L3172	L3173	L3174	L3175	L3176	L3177	L3178	L3179	L3180	L3181	L3182	L3183	L3184	L3185	L3186	L3187	L3188	L3189	L3190	L3191	L3192	L3193	L3194	L3195	L3196	L3197	L3198	L3199	L3200	L3201	L3202	L3203	L3204	L3205	L3206	L3207	L3208	L3209	L3210	L3211	L3212	L3213	L3214	L3215	L3216	L3217	L3218	L3219	L3220	L3221	L3222	L3223	L3224	L3225	L3226	L3227	L3228	L3229	L3230	L3231	L3232	L3233	L3234	L3235	L3236	L3237	L3238	L3239	L3240	L3241	L3242	L3243	L3244	L3245	L3246	L3247	L3248	L3249	L3250	L3251	L3252	L3253	L3254	L3255	L3256	L3257	L3258	L3259	L3260	L3261	L3262	L3263	L3264	L3265	L3266	L3267	L3268	L3269	L3270	L3271	L3272	L3273	L3274	L3275	L3276	L3277	L3278	L3279	L3280	L3281	L3282	L3283	L3284	L3285	L3286	L3287	L3288	L3289	L3290	L3291	L3292	L3293	L3294	L3295	L3296	L3297	L3298	L3299	L3300	L3301	L3302	L3303	L3304	L3305	L3306	L3307	L3308	L3309	L3310	L3311	L3312	L3313	L3314	L3315	L3316	L3317	L3318	L3319	L3320	L3321	L3322	L3323	L3324	L3325	L3326	L3327	L3328	L3329	L3330	L3331	L3332	L3333	L3334	L3335	L3336	L3337	L3338	L3339	L3340	L3341	L3342	L3343	L3344	L3345	L3346	L3347	L3348	L3349	L3350	L3351	L3352	L3353	L3354	L3355	L3356	L3357	L3358	L3359	L3360	L3361	L3362	L3363	L3364	L3365	L3366	L3367	L3368	L3369	L3370	L3371	L3372	L3373	L3374	L3375	L3376	L3377	L3378	L3379	L3380	L3381	L3382	L3383	L3384	L3385	L3386	L3387	L3388	L3389	L3390	L3391	L3392	L3393	L3394	L3395	L3396	L3397	L3398	L3399	L3400	L3401	L3402	L3403	L3404	L3405	L3406	L3407	L3408	L3409	L3410	L3411	L3412	L3413	L3414	L3415	L3416	L3417	L3418	L3419	L3420	L3421	L3422	L3423	L3424	L3425	L3426	L3427	L3428	L3429	L3430	L3431	L3432	L3433	L3434	L3435	L3436	L3437	L3438	L3439	L3440	L3441	L3442	L3443	L3444	L3445	L3446	L3447	L3448	L3449	L3450	L3451	L3452	L3453	L3454	L3455	L3456	L3457	L3458	L3459	L3460	L3461	L3462	L3463	L3464	L3465	L3466	L3467	L3468	L3469	L3470	L3471	L3472	L3473	L3474	L3475	L3476	L3477	L3478	L3479	L3480	L3481	L3482	L3483	L3484	L3485	L3486	L3487	L3488	L3489	L3490	L3491	L3492	L3493	L3494	L3495	L3496	L3497	L3498	L3499	L3500	L3501	L3502	L3503	L3504	L3505	L3506	L3507	L3508	L3509	L3510	L3511	L3512	L3513	L3514	L3515	L3516	L3517	L3518	L3519	L3520	L3521	L3522	L3523	L3524	L3525	L3526	L3527	L3528	L3529	L3530	L3531	L3532	L3533	L3534	L3535	L3536	L3537	L3538	L3539	L3540	L3541	L3542	L3543	L3544	L3545	L3546	L3547	L3548	L3549	L3550	L3551	L3552	L3553	L3554	L3555	L3556	L3557	L3558	L3559	L3560	L3561	L3562	L3563	L3564	L3565	L3566	L3567	L3568	L3569	L3570	L3571	L3572	L3573	L3574	L3575	L3576	L3577	L3578	L3579	L3580	L3581	L3582	L3583	L3584	L3585	L3586	L3587	L3588	L3589	L3590
ASP	GLY	ASP	GLY	K1469	L1470	L1471	L1472	G1473	I1474	K1475	G1476	N1477	P1478	N1479	F1480	G1481	L1482	V1483	R1484	N1485	L1486	M1487	G1488	V1489	K1491	S1492	R1493	A1494	D1495	H1496	K1497	D1498	I1499	K1500	G1501	E1502	V1503	M1504	F1505	M1506	E1507	L1508	R1509	L1510	A1511	D1512	L1513	E1514	N1515	K1516	G1517	A1520	A1521	I1522	D1526	T1527																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
M1528	M1529	A1530	D1531	F1532	A1533	T1534	V1535	G1539	R1540	K1541	S1542	T1543	F1546	G1547	S1548	L1549	E1550	Q1551	G1552	N1553	N1554	E1555	D1557	E1559	D1560	Q1561	Q1562	Q1563	Y1564	I1565	I1566	T1567	D1568	M1569	L1570	L1571	L1572	K1573	K1574	L1575	L1576	P1577	K1578	K1579	W1580	N1581	K1582	N1583	L1584	F1585	F1586	Y1588	Y1589	I1590																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																
G1591	E1592	E1593	V1594	I1595	T1596	D1600	P1601	F1602	N1603	Q1604	D1605	I1606	N1607	K1608	L1609	Q1610	R1613	E1614	T1615	L1616	D1617	Q1618	R1619	E1620	K1621	D1622	N1623	I1624	R1625	V1626	R1627	A1628	I1629	D1630	T1631	T1632	K1633	R1634	K1635	S1636	I1637	M1638	F1639	I1640	G1641	V1642	R1643	K1644	D1645	R1646	A1647	PRO	GLU	GLN	LYS	PRO	HIS																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																													
VAL	Y1655	D1656	I1657	E1658	M1659	F1660	T1661	S1663	L1664	S1665	Y1666	N1667	Q1668	V1669	E1670	H1671	D1673	Y1674	E1675	V1676	A1677	D1678	Y1679	E1680	D1681	E1682	Q1683	S1684	M1685	S1686	A1687	V1688	M1689	Y1690	A1691	Y1692	F1693	L1694	GLN	PRO	LYS	GLU	VAL	PRO	PHE	LYS	SER	THR	PHE	MET	LYS	LYS	SER	GLU	TYR																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																															
TRP	LYS	LEU	LEU	SER	ASP	PHE	ASN	ASN	Y1724	L1725	P1726	S1727	N1728	I1729	S1730	F1731	N1732	T1733	M1734	L1735	L1736	Q1737	S1738	N1740	R1741	Q1742	R1745	E1746	V1747	GLU	VAL	GLU	GLY	ILE	G1753	L1754	D1755	P1756	L1757	Y1758	R1759	R1760	M1761	F1762	A1763	F1764	M1765	Y1766	Q1767	Y1768	G1769	F1772	N1773	L177																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																



• Molecule 2: Peptidyl-prolyl cis-trans isomerase



• Molecule 3: Plug





4 Experimental information

Property	Value	Source
EM reconstruction method	SINGLE PARTICLE	Depositor
Imposed symmetry	POINT, C1	Depositor
Number of particles used	150000	Depositor
Resolution determination method	FSC 0.143 CUT-OFF	Depositor
CTF correction method	PHASE FLIPPING AND AMPLITUDE CORRECTION	Depositor
Microscope	FEI TITAN KRIOS	Depositor
Voltage (kV)	300	Depositor
Electron dose ($e^-/\text{\AA}^2$)	52	Depositor
Minimum defocus (nm)	Not provided	
Maximum defocus (nm)	Not provided	
Magnification	Not provided	
Image detector	GATAN K2 QUANTUM (4k x 4k)	Depositor
Maximum map value	0.251	Depositor
Minimum map value	-0.101	Depositor
Average map value	0.002	Depositor
Map value standard deviation	0.013	Depositor
Recommended contour level	0.0874	Depositor
Map size (Å)	246.0, 246.0, 246.0	wwPDB
Map dimensions	300, 300, 300	wwPDB
Map angles (°)	90.0, 90.0, 90.0	wwPDB
Pixel spacing (Å)	0.82, 0.82, 0.82	Depositor

5 Model quality [i](#)

5.1 Standard geometry [i](#)

The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 5$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	# Z >5	RMSZ	# Z >5
1	A	0.40	0/16188	0.55	0/21960
2	B	0.36	0/992	0.52	0/1347
3	C	0.44	0/3341	0.51	0/4542
All	All	0.40	0/20521	0.54	0/27849

Chiral center outliers are detected by calculating the chiral volume of a chiral center and verifying if the center is modelled as a planar moiety or with the opposite hand. A planarity outlier is detected by checking planarity of atoms in a peptide group, atoms in a mainchain group or atoms of a sidechain that are expected to be planar.

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	A	0	6

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

All (6) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	1675	GLU	Peptide
1	A	2250	SER	Peptide
1	A	394	GLY	Peptide
1	A	563	SER	Peptide
1	A	564	PHE	Peptide
1	A	821	PRO	Peptide

5.2 Too-close contacts [i](#)

In the following table, the Non-H and H(model) columns list the number of non-hydrogen atoms and hydrogen atoms in the chain respectively. The H(added) column lists the number of hydrogen atoms added and optimized by MolProbity. The Clashes column lists the number of clashes within

the asymmetric unit, whereas Symm-Clashes lists symmetry-related clashes.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	15853	0	15281	1411	0
2	B	973	212	966	65	0
3	C	3263	0	3109	258	0
All	All	20089	212	19356	1695	0

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 43.

All (1695) close contacts within the same asymmetric unit are listed below, sorted by their clash magnitude.

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:251:ARG:HB3	1:A:765:LYS:HB3	1.33	1.06
1:A:527:VAL:HG22	1:A:618:ILE:HG12	1.43	0.99
1:A:225:VAL:HG11	1:A:257:VAL:HG13	1.45	0.98
1:A:216:ILE:HG23	1:A:217:ILE:HD12	1.44	0.97
1:A:1049:GLU:HA	1:A:1159:VAL:HG12	1.42	0.97
1:A:1012:LEU:HD23	1:A:1253:ARG:HB2	1.43	0.97
1:A:827:VAL:HG11	1:A:1531:ASP:HB2	1.48	0.96
1:A:1663:SER:HB2	1:A:1687:ALA:HB3	1.46	0.96
1:A:182:LYS:HB3	1:A:188:GLU:HG2	1.47	0.95
1:A:2351:ASN:HB2	1:A:2379:LYS:HB2	1.49	0.95
1:A:993:ALA:HB2	1:A:1162:ILE:HG22	1.47	0.94
2:B:35:ILE:HD12	2:B:145:PHE:HB3	1.49	0.94
1:A:657:ARG:HE	1:A:661:ARG:HG3	1.33	0.94
1:A:1774:LEU:HB2	1:A:1778:LEU:HD12	1.48	0.93
1:A:1095:LEU:HD11	1:A:1103:ILE:HD12	1.50	0.93
1:A:400:LEU:HD22	1:A:404:ILE:HD13	1.50	0.92
1:A:1563:GLN:HG3	1:A:1593:GLU:HG2	1.49	0.92
1:A:342:ARG:HH21	1:A:485:ALA:HA	1.34	0.92
1:A:1189:GLU:HB2	1:A:1192:ILE:HD13	1.50	0.91
1:A:1733:THR:HG22	1:A:1766:TYR:HB3	1.49	0.91
1:A:2094:ARG:HH12	1:A:2145:LYS:HE3	1.35	0.91
1:A:146:ASP:HB3	1:A:2396:THR:HG22	1.51	0.91
1:A:486:THR:HG22	1:A:500:THR:HG22	1.52	0.90
1:A:1494:ALA:HB3	1:A:1499:ILE:HD11	1.53	0.90
1:A:1352:ASP:HA	1:A:1481:GLY:HA2	1.52	0.90
1:A:1965:PRO:HD3	1:A:1996:TRP:HB2	1.53	0.90
1:A:1290:VAL:HG23	1:A:1329:ALA:HB2	1.53	0.90
1:A:498:ILE:HD12	1:A:1057:VAL:HG21	1.55	0.89
1:A:873:ALA:HB2	1:A:912:THR:HG23	1.55	0.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1447:ARG:HB3	1:A:1451:GLY:HA2	1.54	0.88
3:C:288:ASN:HA	3:C:328:ILE:HG21	1.55	0.88
1:A:2139:TYR:HE2	1:A:2145:LYS:HB3	1.37	0.88
1:A:182:LYS:HE2	1:A:185:THR:HA	1.55	0.88
3:C:85:ILE:HD11	3:C:403:TYR:HB3	1.54	0.87
1:A:237:ALA:HB1	1:A:240:LEU:HD21	1.55	0.87
1:A:1027:GLY:HA3	1:A:1181:VAL:HB	1.56	0.87
3:C:54:THR:HG22	3:C:120:PRO:HG3	1.57	0.86
3:C:178:LEU:HD23	3:C:200:LEU:HD23	1.56	0.86
1:A:1492:SER:HB2	1:A:1499:ILE:HD13	1.56	0.86
1:A:963:THR:HG23	1:A:1251:THR:HG22	1.57	0.85
1:A:1035:GLU:HG3	1:A:1237:ARG:HD2	1.58	0.85
2:B:39:LEU:HD21	2:B:45:THR:HA	1.56	0.85
1:A:1738:GLN:HB2	1:A:1761:ASN:HB3	1.58	0.85
1:A:1561:VAL:HG12	1:A:1595:ILE:HG12	1.56	0.85
1:A:2254:ARG:HG3	1:A:2268:GLU:HG2	1.57	0.85
1:A:157:PRO:HA	1:A:1151:ARG:HH21	1.39	0.85
1:A:321:LEU:HD23	1:A:464:PHE:HB3	1.59	0.85
3:C:33:ILE:HD13	3:C:145:VAL:HG11	1.60	0.84
1:A:820:LEU:HD23	1:A:823:ILE:HD12	1.57	0.84
3:C:326:THR:HG23	3:C:332:TYR:HA	1.59	0.83
1:A:281:LEU:HD11	1:A:531:PRO:HD3	1.60	0.83
1:A:769:LYS:H	3:C:169:LEU:HD13	1.40	0.83
1:A:879:ALA:HB1	1:A:1240:ARG:HD2	1.58	0.83
1:A:1824:VAL:HG22	1:A:1847:THR:HG22	1.61	0.82
1:A:1821:GLN:HB2	1:A:1850:TYR:HB3	1.62	0.82
1:A:1958:THR:HG22	1:A:2009:GLN:HG2	1.60	0.82
1:A:2349:GLY:HA3	1:A:2381:VAL:HG11	1.61	0.82
1:A:803:ASN:HA	1:A:836:GLU:HG2	1.62	0.82
1:A:1203:LEU:HD11	1:A:1209:THR:HG23	1.61	0.82
1:A:1284:GLU:HB2	1:A:1333:GLY:HA3	1.60	0.81
1:A:1447:ARG:HG2	1:A:1453:TYR:HB2	1.63	0.81
1:A:1009:PHE:HB3	1:A:1257:LEU:HA	1.63	0.80
1:A:2115:TYR:HE1	1:A:2141:ILE:HD12	1.46	0.80
1:A:2029:VAL:HG12	1:A:2182:ILE:HG12	1.64	0.80
1:A:1008:GLN:HG2	1:A:1217:LYS:HG2	1.64	0.80
1:A:1011:VAL:HG13	1:A:1252:VAL:HG13	1.64	0.79
1:A:428:LEU:HD21	1:A:459:ILE:HD12	1.65	0.79
1:A:2123:PRO:HD3	1:A:2133:TYR:HD2	1.47	0.79
1:A:1789:ILE:HG12	1:A:1817:ASN:HB2	1.65	0.79
1:A:871:ARG:HH21	1:A:1256:ALA:HB2	1.48	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1378:GLU:HA	1:A:1493:ARG:HG2	1.63	0.79
1:A:439:TYR:HA	1:A:450:LEU:HA	1.64	0.78
1:A:1735:ILE:HG22	1:A:1737:ARG:HG3	1.64	0.78
1:A:2252:LEU:HD13	1:A:2253:ILE:HG23	1.65	0.78
1:A:1074:LEU:HD13	1:A:1075:ILE:HG13	1.65	0.78
1:A:565:PRO:HG2	1:A:568:PRO:HB3	1.63	0.78
1:A:2120:ASN:HD21	1:A:2141:ILE:HD13	1.46	0.78
1:A:225:VAL:HG13	1:A:244:LYS:HB2	1.65	0.78
3:C:175:LYS:HE3	3:C:232:GLN:HG2	1.65	0.78
1:A:207:LEU:HB3	1:A:222:VAL:HG22	1.65	0.78
1:A:1173:ALA:HB1	1:A:1230:ILE:HB	1.65	0.78
1:A:190:ASN:HB3	1:A:206:LYS:HB3	1.66	0.77
1:A:227:MET:HB2	1:A:257:VAL:HG21	1.66	0.77
1:A:831:LEU:HD23	1:A:1527:THR:HG22	1.67	0.77
1:A:294:LEU:HD21	1:A:448:ILE:HG13	1.67	0.77
1:A:1052:LEU:HD21	1:A:1069:PRO:HD3	1.64	0.77
1:A:777:LEU:HD13	1:A:1549:LEU:HD11	1.67	0.77
1:A:309:TYR:OH	1:A:584:ASN:O	2.04	0.76
1:A:318:ILE:HD13	1:A:466:TYR:HB3	1.67	0.76
3:C:135:LEU:HD21	3:C:137:ILE:HD11	1.67	0.76
3:C:219:ILE:HD11	3:C:222:GLN:HE21	1.49	0.76
1:A:2184:TYR:HE2	1:A:2187:LEU:HB2	1.51	0.76
1:A:343:ASN:HD22	1:A:429:GLU:HA	1.49	0.76
1:A:2068:SER:OG	1:A:2179:ASN:OD1	2.03	0.76
1:A:1777:SER:HB2	1:A:1828:ASP:HB2	1.67	0.76
1:A:526:ASN:ND2	1:A:621:THR:O	2.19	0.75
1:A:1082:PRO:HB3	1:A:1144:VAL:HG21	1.68	0.75
1:A:761:ASN:HA	1:A:775:THR:H	1.52	0.75
1:A:1042:LYS:O	1:A:1065:TRP:NE1	2.19	0.75
1:A:1384:ARG:HB2	1:A:1487:MET:HB3	1.69	0.75
1:A:233:LEU:HD21	1:A:1522:ILE:HD11	1.68	0.74
1:A:1433:MET:HE1	1:A:1474:ILE:HG23	1.69	0.74
1:A:1961:PRO:O	1:A:2045:TYR:OH	2.05	0.74
2:B:122:LEU:HD12	2:B:125:LEU:HD12	1.69	0.74
1:A:908:LEU:HD23	1:A:988:GLY:HA3	1.69	0.74
1:A:882:PRO:O	1:A:893:ASN:ND2	2.17	0.74
1:A:2017:VAL:HB	1:A:2033:MET:HG3	1.68	0.74
1:A:276:VAL:HB	1:A:683:LYS:HD3	1.68	0.74
1:A:1060:ASN:HB3	1:A:1061:PRO:HD3	1.67	0.74
1:A:240:LEU:HD12	1:A:260:GLU:HB3	1.67	0.74
1:A:1831:ILE:HG22	1:A:1837:PHE:HB3	1.70	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2030:ASP:OD1	1:A:2181:SER:OG	2.06	0.73
3:C:90:TYR:HB3	3:C:129:LEU:HD12	1.70	0.73
1:A:276:VAL:HA	1:A:683:LYS:HG2	1.69	0.73
1:A:1643:ARG:HG2	1:A:1661:THR:HG22	1.70	0.73
1:A:353:ALA:HB2	1:A:385:ASN:HB3	1.71	0.73
3:C:165:ARG:HD3	3:C:419:ASN:HB3	1.70	0.73
1:A:344:ILE:HG22	1:A:346:ALA:H	1.52	0.73
1:A:251:ARG:NH1	1:A:765:LYS:O	2.21	0.73
1:A:1640:ILE:O	1:A:1663:SER:OG	2.06	0.73
1:A:1737:ARG:NH2	1:A:1809:ASP:O	2.22	0.73
1:A:2031:LEU:HB3	1:A:2178:PRO:HB3	1.71	0.73
3:C:314:ALA:HB1	3:C:379:ILE:HD11	1.70	0.72
1:A:1078:PHE:N	1:A:2383:SER:OG	2.22	0.72
1:A:282:TYR:HB3	1:A:674:ASN:HD21	1.53	0.72
1:A:1307:PRO:HD3	1:A:1417:TRP:HB2	1.72	0.72
3:C:243:GLU:HG2	3:C:245:LYS:HG3	1.71	0.72
1:A:382:SER:N	1:A:385:ASN:OD1	2.23	0.71
2:B:133:ILE:HG22	2:B:134:PRO:HD3	1.72	0.71
3:C:236:GLY:H	3:C:382:ASN:HA	1.55	0.71
1:A:895:ASN:ND2	1:A:900:GLU:OE2	2.23	0.71
1:A:2168:SER:OG	1:A:2173:ARG:NH1	2.22	0.71
1:A:2139:TYR:CE2	1:A:2145:LYS:HB3	2.25	0.71
1:A:2229:ASP:N	1:A:2233:ASN:O	2.20	0.71
1:A:395:GLN:NE2	2:B:94:ASN:O	2.23	0.71
1:A:488:VAL:HG12	1:A:498:ILE:HG12	1.72	0.71
2:B:111:PHE:HB2	2:B:159:THR:HG22	1.72	0.71
1:A:1358:LYS:HG2	1:A:1426:ALA:HA	1.70	0.71
1:A:769:LYS:HD3	1:A:808:THR:HA	1.73	0.70
1:A:1788:ASN:HB3	1:A:1816:PRO:HA	1.72	0.70
3:C:298:ASP:OD2	3:C:300:SER:OG	2.10	0.70
1:A:1610:GLN:OE1	1:A:1613:ARG:NH2	2.23	0.70
1:A:999:PHE:HE2	1:A:1033:LEU:HD11	1.57	0.70
1:A:1007:ILE:HG12	1:A:1259:LEU:HD23	1.74	0.70
1:A:1880:ASN:HD21	1:A:1982:GLY:HA3	1.57	0.70
1:A:2041:THR:HB	1:A:2061:THR:HG22	1.73	0.70
1:A:2144:THR:OG1	1:A:2233:ASN:OD1	2.07	0.70
1:A:2152:LEU:HD23	1:A:2279:PHE:HZ	1.55	0.70
1:A:323:VAL:HG22	1:A:462:VAL:HG12	1.74	0.70
1:A:1288:ALA:HB3	1:A:1329:ALA:HB3	1.72	0.70
1:A:144:GLU:HB3	1:A:2398:ARG:HG2	1.73	0.70
1:A:1030:TYR:HB2	1:A:1242:PHE:CD2	2.27	0.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2156:LEU:HD13	1:A:2173:ARG:HE	1.57	0.70
1:A:307:LYS:O	1:A:587:ARG:NH1	2.25	0.69
1:A:174:ARG:HH22	1:A:196:GLN:HG2	1.56	0.69
3:C:60:ASP:OD1	3:C:114:HIS:ND1	2.24	0.69
1:A:1036:ILE:HG13	1:A:1174:TYR:CE1	2.27	0.69
1:A:1638:ASN:ND2	3:C:218:THR:O	2.26	0.69
3:C:161:ALA:HA	3:C:180:PHE:HB3	1.75	0.69
1:A:1535:VAL:HG22	1:A:1568:THR:HG22	1.75	0.69
1:A:1039:ASP:HB2	1:A:1170:THR:HG22	1.75	0.69
2:B:96:ASN:HB2	2:B:176:ASN:HB2	1.73	0.69
3:C:304:ASP:HB3	3:C:357:GLN:HE21	1.55	0.69
3:C:78:TYR:HB2	3:C:404:GLN:OE1	1.93	0.69
1:A:218:GLN:NE2	1:A:248:GLN:OE1	2.27	0.68
1:A:390:PRO:HA	1:A:393:ILE:HD11	1.75	0.68
1:A:467:THR:HG22	1:A:472:VAL:HG22	1.75	0.68
1:A:1299:CYS:HB3	1:A:1300:PRO:HD3	1.75	0.68
2:B:94:ASN:OD1	2:B:123:ARG:NH2	2.26	0.68
3:C:305:TYR:HE1	3:C:356:LYS:HB2	1.58	0.68
1:A:1015:TYR:CD2	1:A:1183:PRO:HA	2.28	0.68
1:A:1124:ALA:O	1:A:1131:ARG:NH1	2.26	0.68
3:C:131:GLY:HA2	3:C:406:VAL:HG23	1.76	0.68
3:C:324:TYR:HD2	3:C:334:LEU:HD22	1.58	0.68
1:A:1030:TYR:HB2	1:A:1242:PHE:HD2	1.58	0.68
1:A:1358:LYS:HB2	1:A:1511:ALA:CB	2.24	0.68
1:A:1338:GLN:O	1:A:1492:SER:OG	2.11	0.68
1:A:1587:ASN:HD21	3:C:219:ILE:HG22	1.59	0.68
1:A:309:TYR:HB2	1:A:310:PRO:HD3	1.74	0.68
1:A:232:THR:HG22	3:C:418:VAL:HA	1.75	0.68
1:A:932:LEU:HA	1:A:1018:ASN:HB3	1.75	0.68
1:A:1403:THR:HA	1:A:1418:MET:HE3	1.76	0.68
1:A:1772:PHE:HB2	1:A:1780:LEU:O	1.94	0.68
1:A:1675:GLU:HA	1:A:1745:ARG:HG2	1.76	0.68
2:B:143:GLN:HG2	2:B:169:GLU:HG2	1.75	0.67
3:C:98:ARG:HH12	3:C:100:MET:HG2	1.59	0.67
3:C:297:ALA:N	3:C:302:GLU:OE1	2.27	0.67
1:A:162:ARG:NH2	1:A:920:SER:O	2.27	0.67
1:A:857:TYR:H	1:A:1509:ARG:HB2	1.59	0.67
1:A:1283:VAL:HA	1:A:1335:ALA:HB3	1.77	0.67
1:A:810:VAL:HG11	1:A:813:LEU:HD12	1.77	0.67
1:A:1819:HIS:CE1	1:A:1971:GLY:HA2	2.29	0.67
1:A:908:LEU:HB3	1:A:964:TYR:HD1	1.60	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:135:ILE:HG23	1:A:183:ILE:HG22	1.76	0.67
1:A:2113:PRO:HG2	1:A:2141:ILE:HG22	1.77	0.67
1:A:326:THR:HG22	1:A:428:LEU:HD21	1.76	0.67
1:A:922:PRO:HB3	1:A:1122:LEU:HD11	1.77	0.67
1:A:1732:ASN:O	1:A:1766:TYR:HA	1.95	0.67
3:C:323:ILE:HD12	3:C:349:PHE:CE2	2.30	0.66
1:A:538:GLN:HB2	1:A:604:TYR:CE2	2.31	0.66
3:C:387:GLU:HG3	3:C:415:ILE:HG23	1.75	0.66
1:A:771:VAL:HG22	1:A:805:ASN:HB3	1.77	0.66
1:A:2100:ARG:NH1	1:A:2167:SER:O	2.29	0.66
1:A:350:LEU:HD21	1:A:390:PRO:HD3	1.78	0.66
1:A:1075:ILE:HD12	1:A:2347:ALA:HB1	1.77	0.66
1:A:1327:ALA:HB1	1:A:1505:PHE:O	1.96	0.66
1:A:2299:ARG:HB2	3:C:107:ASN:OD1	1.95	0.66
1:A:2120:ASN:ND2	1:A:2141:ILE:HD13	2.10	0.66
1:A:1036:ILE:HD13	1:A:1238:PHE:O	1.96	0.66
1:A:1048:TYR:OH	1:A:1094:GLY:N	2.28	0.66
2:B:35:ILE:HG21	2:B:54:TYR:CD2	2.30	0.66
1:A:907:LYS:HB3	1:A:968:GLU:HB2	1.76	0.66
1:A:1580:TRP:O	1:A:1644:LYS:NZ	2.29	0.66
1:A:2024:LEU:HB3	1:A:2025:PRO:HD2	1.78	0.66
1:A:2148:GLN:HE21	1:A:2240:MET:HG2	1.60	0.66
1:A:1480:PHE:HA	1:A:1483:VAL:HG23	1.78	0.65
1:A:1521:ALA:O	1:A:1540:ARG:HA	1.95	0.65
1:A:1730:SER:OG	1:A:1768:TYR:O	2.12	0.65
1:A:2302:ASP:HB3	1:A:2318:LYS:HA	1.77	0.65
1:A:1013:ASP:HB3	1:A:1212:ARG:HB2	1.77	0.65
3:C:23:ILE:HB	3:C:82:PRO:HD2	1.79	0.65
1:A:2350:GLN:HB3	1:A:2352:ILE:HD12	1.77	0.65
3:C:249:ALA:O	3:C:257:ILE:HD12	1.95	0.65
1:A:375:ASN:ND2	1:A:385:ASN:HA	2.12	0.65
1:A:1778:LEU:HD23	1:A:1827:TYR:CD1	2.32	0.65
1:A:364:VAL:HG12	1:A:366:ILE:H	1.61	0.65
1:A:1363:LEU:HD22	1:A:1400:LEU:HD21	1.79	0.65
1:A:1947:ASN:HB2	1:A:2020:ASN:HD22	1.62	0.65
1:A:1780:LEU:HD23	1:A:1825:LEU:HB3	1.77	0.65
3:C:37:THR:HG22	3:C:38:PHE:H	1.62	0.65
1:A:422:ALA:CB	1:A:512:LEU:HD12	2.26	0.65
1:A:1371:GLN:HB3	1:A:1372:PRO:HD2	1.79	0.65
2:B:27:TYR:O	2:B:31:ASN:ND2	2.30	0.65
1:A:332:VAL:HG21	1:A:1074:LEU:HD11	1.78	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1180:ASP:HB2	1:A:1190:ASN:HD21	1.60	0.65
1:A:2202:LEU:HD23	1:A:2255:MET:HB3	1.77	0.65
1:A:488:VAL:HG11	1:A:2341:TYR:CD1	2.32	0.65
1:A:1066:GLY:HA3	1:A:1093:ASP:O	1.98	0.64
1:A:871:ARG:HE	1:A:1256:ALA:HA	1.61	0.64
1:A:884:ILE:HA	1:A:1176:GLU:OE2	1.97	0.64
1:A:1680:GLU:OE2	1:A:1741:ARG:NE	2.31	0.64
1:A:1737:ARG:HG2	1:A:1762:PHE:HD1	1.61	0.64
1:A:1874:ASN:HB2	1:A:1963:TYR:O	1.97	0.64
1:A:2362:SER:HA	1:A:2368:THR:HG22	1.79	0.64
2:B:98:THR:HA	2:B:118:VAL:O	1.98	0.64
1:A:249:PHE:HB3	1:A:252:THR:OG1	1.97	0.64
1:A:426:SER:HB2	1:A:459:ILE:HD13	1.79	0.64
2:B:92:THR:O	2:B:122:LEU:HD23	1.98	0.64
1:A:543:LEU:HD21	1:A:678:LEU:HD12	1.80	0.64
1:A:1389:PHE:CE1	1:A:1485:ASN:HB3	2.33	0.64
1:A:2038:SER:O	1:A:2063:GLY:HA3	1.97	0.64
1:A:2229:ASP:OD1	1:A:2233:ASN:N	2.30	0.64
1:A:452:GLN:HG3	1:A:453:ARG:H	1.63	0.64
1:A:2026:ASP:HB3	1:A:2186:GLY:HA3	1.79	0.64
1:A:2051:THR:HG22	1:A:2053:GLU:HB2	1.79	0.64
1:A:1182:LYS:HB3	1:A:1183:PRO:HD2	1.79	0.64
1:A:565:PRO:CG	1:A:568:PRO:HB3	2.28	0.64
1:A:1368:LEU:HD22	1:A:1371:GLN:HG3	1.79	0.64
1:A:1774:LEU:HG	1:A:1780:LEU:HD12	1.80	0.64
1:A:1264:TRP:HB3	1:A:1345:VAL:CG1	2.27	0.64
1:A:325:VAL:HG22	1:A:460:LEU:HD23	1.80	0.64
1:A:498:ILE:CD1	1:A:1057:VAL:HG21	2.28	0.64
1:A:2001:GLN:NE2	1:A:2047:VAL:O	2.30	0.64
1:A:2081:GLU:HB3	1:A:2335:LEU:HD21	1.81	0.64
1:A:2258:GLU:HG3	1:A:2264:ARG:HG2	1.79	0.64
1:A:342:ARG:HG2	1:A:2281:ASN:HB3	1.81	0.63
1:A:1039:ASP:OD2	1:A:1042:LYS:HA	1.98	0.63
1:A:2095:LEU:HD13	1:A:2139:TYR:CD1	2.34	0.63
1:A:2216:ARG:HG3	1:A:2217:SER:H	1.64	0.63
1:A:943:LEU:HD21	1:A:1213:TRP:CH2	2.33	0.63
1:A:1600:ASP:HB3	1:A:1608:LEU:HD23	1.81	0.63
1:A:1823:LEU:HD21	1:A:1825:LEU:HD23	1.79	0.63
1:A:1829:ILE:HG22	1:A:1831:ILE:HG12	1.78	0.63
1:A:1855:SER:HB3	1:A:1874:ASN:H	1.63	0.63
1:A:1080:THR:HG21	1:A:2380:ALA:O	1.99	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2033:MET:HE3	1:A:2176:PRO:HG2	1.80	0.63
1:A:896:SER:OG	1:A:1042:LYS:NZ	2.22	0.63
1:A:222:VAL:HG12	1:A:243:VAL:HG22	1.80	0.63
1:A:372:PHE:HB2	1:A:387:LYS:HB2	1.81	0.63
1:A:769:LYS:HD3	1:A:808:THR:HG23	1.80	0.63
3:C:310:PHE:HD2	3:C:325:ILE:HD13	1.62	0.63
1:A:365:VAL:HG22	1:A:518:PRO:HD2	1.81	0.63
1:A:453:ARG:O	1:A:454:LEU:HD22	1.99	0.63
3:C:60:ASP:OD2	3:C:356:LYS:NZ	2.26	0.63
1:A:969:ARG:NH2	1:A:1114:THR:O	2.32	0.62
1:A:1609:ASP:HB3	1:A:1613:ARG:HE	1.64	0.62
1:A:1622:ASP:O	1:A:1626:THR:OG1	2.09	0.62
3:C:368:ASP:N	3:C:372:ASN:O	2.29	0.62
1:A:886:SER:HA	1:A:1227:ILE:HG23	1.81	0.62
1:A:1009:PHE:HA	1:A:1256:ALA:O	1.99	0.62
1:A:569:ALA:HB1	1:A:570:PRO:HD2	1.81	0.62
2:B:104:TYR:HA	2:B:110:VAL:HA	1.81	0.62
1:A:320:ARG:HH12	1:A:2239:ILE:HG21	1.63	0.62
1:A:326:THR:HG22	1:A:428:LEU:CD2	2.29	0.62
1:A:1063:PRO:HG2	1:A:1068:VAL:HB	1.80	0.62
3:C:252:ASN:O	3:C:254:VAL:HG13	2.00	0.62
1:A:492:ASN:HB3	1:A:495:ASN:HB2	1.82	0.62
1:A:867:THR:HG22	1:A:1260:VAL:HG23	1.80	0.62
1:A:910:TRP:H	1:A:1136:ASN:HD21	1.48	0.62
1:A:1670:GLU:HA	1:A:1679:TYR:O	2.00	0.62
1:A:1842:ALA:CB	1:A:1886:THR:HG22	2.30	0.62
1:A:1857:THR:HB	1:A:1861:GLU:OE2	1.99	0.62
1:A:1076:TYR:CD1	1:A:1159:VAL:HG11	2.33	0.62
1:A:2283:LEU:HD13	1:A:2336:VAL:HG13	1.81	0.62
2:B:54:TYR:HB2	2:B:145:PHE:HB2	1.80	0.62
1:A:342:ARG:HH12	1:A:503:LEU:HB2	1.65	0.62
1:A:881:THR:HG22	1:A:987:PHE:CZ	2.35	0.62
1:A:966:PRO:O	1:A:983:PRO:HB3	1.99	0.62
1:A:974:ASN:HB2	1:A:1106:ASN:OD1	2.00	0.62
1:A:1290:VAL:HG13	1:A:1295:ASN:HB2	1.81	0.62
1:A:1432:ARG:O	1:A:1436:LYS:HG2	2.00	0.62
1:A:1851:MET:HE2	1:A:1853:GLN:HE21	1.65	0.62
1:A:2021:ILE:HB	1:A:2029:VAL:HG23	1.81	0.62
3:C:166:THR:HG21	3:C:171:ASN:O	1.99	0.62
1:A:924:GLY:HA3	1:A:1131:ARG:NH2	2.15	0.62
1:A:1199:THR:O	1:A:1210:ASN:ND2	2.33	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1378:GLU:HA	1:A:1493:ARG:CG	2.30	0.62
1:A:1609:ASP:O	1:A:1613:ARG:N	2.27	0.62
2:B:61:GLY:HA3	2:B:138:SER:O	2.00	0.62
1:A:369:THR:HA	1:A:372:PHE:HE1	1.64	0.62
1:A:1782:TYR:OH	1:A:1821:GLN:NE2	2.28	0.62
1:A:2283:LEU:HD13	1:A:2336:VAL:CG1	2.30	0.62
1:A:542:ARG:O	1:A:680:GLY:HA2	2.00	0.61
1:A:1374:LEU:HD22	1:A:1499:ILE:HG23	1.81	0.61
1:A:2254:ARG:HA	1:A:2267:SER:O	2.00	0.61
1:A:1969:PHE:CD2	1:A:1970:LEU:HG	2.35	0.61
1:A:2115:TYR:CE1	1:A:2141:ILE:HA	2.35	0.61
1:A:334:THR:HG21	1:A:2285:THR:CB	2.30	0.61
1:A:992:ARG:O	1:A:1238:PHE:HA	2.00	0.61
1:A:1008:GLN:HE21	1:A:1217:LYS:HE3	1.65	0.61
1:A:1027:GLY:HA2	1:A:1246:PHE:CE1	2.35	0.61
1:A:1049:GLU:HG3	1:A:1050:ASN:O	2.01	0.61
1:A:470:GLY:HA3	1:A:2057:LEU:HD12	1.81	0.61
3:C:134:ILE:HG12	3:C:149:LYS:HG2	1.80	0.61
3:C:245:LYS:HE3	3:C:294:ILE:HD11	1.80	0.61
1:A:777:LEU:HD13	1:A:1549:LEU:CD1	2.30	0.61
3:C:92:ARG:HE	3:C:126:GLN:HE21	1.48	0.61
1:A:820:LEU:HG	1:A:821:PRO:HD2	1.81	0.61
1:A:1374:LEU:HB2	1:A:1402:VAL:HG21	1.82	0.61
1:A:2367:LEU:H	1:A:2367:LEU:HD23	1.66	0.61
3:C:135:LEU:HD21	3:C:137:ILE:CD1	2.30	0.61
1:A:1451:GLY:O	1:A:1475:LYS:HG2	2.00	0.61
1:A:1580:TRP:HB3	1:A:1582:ILE:CD1	2.31	0.61
1:A:1789:ILE:HD11	1:A:1817:ASN:HD22	1.64	0.61
3:C:323:ILE:HD12	3:C:349:PHE:HE2	1.66	0.61
1:A:882:PRO:HB3	1:A:1242:PHE:CZ	2.36	0.60
1:A:2112:ILE:H	1:A:2112:ILE:HD12	1.65	0.60
1:A:174:ARG:HA	1:A:195:THR:HG21	1.83	0.60
1:A:470:GLY:CA	1:A:2057:LEU:HD12	2.32	0.60
1:A:1039:ASP:HB2	1:A:1168:MET:HE2	1.83	0.60
1:A:183:ILE:HG13	1:A:187:LEU:HD21	1.82	0.60
1:A:420:SER:OG	1:A:423:THR:HG22	2.01	0.60
1:A:908:LEU:HD11	1:A:990:ILE:HD11	1.82	0.60
1:A:760:PHE:O	1:A:775:THR:HA	2.02	0.60
1:A:1197:GLU:OE2	1:A:1212:ARG:NH1	2.34	0.60
1:A:1997:LEU:HD11	1:A:2045:TYR:CE2	2.37	0.60
1:A:2037:TYR:OH	1:A:2039:GLU:OE2	2.19	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2143:TYR:HA	1:A:2147:ASN:HD22	1.66	0.60
3:C:237:ASN:HA	3:C:386:THR:HG21	1.82	0.60
1:A:354:GLN:HB3	1:A:373:PHE:CE2	2.36	0.60
1:A:1394:TYR:OH	1:A:1434:LYS:HD2	2.00	0.60
1:A:1480:PHE:HA	1:A:1483:VAL:CG2	2.31	0.60
1:A:1740:ASN:HB3	1:A:1759:ARG:HB3	1.83	0.60
1:A:773:GLY:HA3	1:A:803:ASN:HB2	1.83	0.60
1:A:2115:TYR:CE1	1:A:2141:ILE:HD12	2.33	0.60
1:A:1359:LEU:HD23	1:A:1510:LEU:CD2	2.32	0.60
1:A:1383:ILE:O	1:A:1395:GLN:HA	2.02	0.60
1:A:137:VAL:HG13	1:A:180:MET:O	2.02	0.60
1:A:321:LEU:CD2	1:A:464:PHE:HB3	2.31	0.60
1:A:876:TRP:HB3	1:A:990:ILE:CG2	2.32	0.60
1:A:1340:GLN:NE2	1:A:1491:LYS:HD3	2.16	0.60
1:A:2114:ARG:O	1:A:2120:ASN:ND2	2.34	0.60
3:C:216:GLN:NE2	3:C:227:TYR:HB3	2.16	0.60
1:A:882:PRO:HD2	1:A:891:THR:HG21	1.84	0.60
1:A:1633:LYS:O	1:A:1669:VAL:HA	2.02	0.60
1:A:2252:LEU:CD1	1:A:2253:ILE:HG23	2.32	0.60
3:C:78:TYR:OH	3:C:211:LYS:HB2	2.02	0.60
1:A:186:ARG:O	1:A:210:THR:OG1	2.17	0.59
3:C:213:ILE:HG23	3:C:227:TYR:OH	2.02	0.59
1:A:255:THR:OG1	1:A:761:ASN:OD1	2.19	0.59
1:A:604:TYR:CD1	1:A:610:VAL:HG21	2.37	0.59
1:A:1015:TYR:HD2	1:A:1183:PRO:HA	1.67	0.59
1:A:1027:GLY:O	1:A:1180:ASP:HA	2.02	0.59
1:A:1162:ILE:HB	1:A:1238:PHE:HE1	1.67	0.59
2:B:48:ARG:HB3	2:B:54:TYR:CE1	2.38	0.59
1:A:414:PHE:CD2	1:A:419:VAL:HG21	2.37	0.59
1:A:1120:TYR:CE1	1:A:1151:ARG:HB2	2.38	0.59
1:A:2259:LEU:HD23	1:A:2263:LEU:HB2	1.83	0.59
3:C:62:LEU:HD21	3:C:305:TYR:CD2	2.37	0.59
1:A:859:ASP:OD2	1:A:1347:LYS:HD3	2.03	0.59
1:A:1978:GLY:O	1:A:1983:SER:HB2	2.02	0.59
1:A:2017:VAL:HB	1:A:2033:MET:CG	2.32	0.59
1:A:2287:VAL:HA	1:A:2333:GLU:O	2.02	0.59
2:B:138:SER:OG	2:B:174:SER:HA	2.02	0.59
3:C:317:PHE:HB2	3:C:379:ILE:CD1	2.32	0.59
1:A:252:THR:O	1:A:254:ILE:HG13	2.02	0.59
1:A:1146:ILE:H	1:A:1146:ILE:HD12	1.66	0.59
1:A:1551:GLN:NE2	1:A:1555:GLU:O	2.34	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1607:LYS:HB2	1:A:1610:GLN:NE2	2.18	0.59
1:A:2029:VAL:CG1	1:A:2182:ILE:HG12	2.31	0.59
3:C:308:VAL:HG11	3:C:355:ILE:HD12	1.85	0.59
1:A:135:ILE:HG23	1:A:183:ILE:CG2	2.33	0.59
1:A:227:MET:CB	1:A:257:VAL:HG21	2.32	0.59
1:A:572:SER:HA	1:A:632:LYS:NZ	2.17	0.59
1:A:1157:PRO:HB2	1:A:1159:VAL:HG13	1.85	0.59
1:A:2254:ARG:HG3	1:A:2268:GLU:CG	2.32	0.59
3:C:171:ASN:HB3	3:C:175:LYS:HG3	1.84	0.59
1:A:831:LEU:O	1:A:833:ILE:HG13	2.02	0.59
1:A:1447:ARG:HB3	1:A:1451:GLY:CA	2.32	0.59
1:A:1513:LEU:HD23	1:A:1513:LEU:H	1.66	0.59
1:A:2060:TYR:HB3	1:A:2219:PHE:CE1	2.37	0.59
2:B:94:ASN:HA	2:B:123:ARG:NH2	2.18	0.59
1:A:252:THR:HG22	1:A:764:HIS:ND1	2.18	0.59
1:A:1194:ASP:OD1	1:A:1298:LYS:HA	2.03	0.59
1:A:1298:LYS:HG2	1:A:1300:PRO:HD2	1.83	0.59
1:A:1572:LEU:HA	1:A:1575:LEU:HD21	1.84	0.59
1:A:1875:THR:HG22	1:A:1961:PRO:HB3	1.84	0.59
1:A:2156:LEU:HD21	1:A:2210:TYR:CE1	2.37	0.59
1:A:2283:LEU:HD22	1:A:2338:TYR:HE1	1.66	0.59
1:A:187:LEU:H	1:A:187:LEU:HD23	1.67	0.59
1:A:1380:VAL:CG2	1:A:1491:LYS:HB3	2.32	0.59
1:A:1768:TYR:OH	1:A:1970:LEU:HD23	2.03	0.59
1:A:328:LYS:HE2	1:A:1165:ASP:OD1	2.02	0.59
1:A:913:ILE:HD11	1:A:961:ASP:OD2	2.03	0.59
1:A:1290:VAL:HG13	1:A:1295:ASN:HD22	1.68	0.59
1:A:1673:ASP:OD1	1:A:1676:VAL:N	2.36	0.59
1:A:2041:THR:CB	1:A:2061:THR:HG22	2.32	0.59
1:A:1174:TYR:HD2	1:A:1227:ILE:HB	1.67	0.58
1:A:1631:TYR:OH	1:A:1633:LYS:HD2	2.03	0.58
1:A:2263:LEU:O	1:A:2265:VAL:N	2.36	0.58
1:A:1560:ASP:O	1:A:1595:ILE:HA	2.03	0.58
3:C:310:PHE:CD2	3:C:325:ILE:HD13	2.38	0.58
1:A:2094:ARG:HH11	1:A:2145:LYS:HB2	1.68	0.58
3:C:247:ILE:HD12	3:C:247:ILE:H	1.67	0.58
1:A:483:VAL:HG21	1:A:501:GLN:HB3	1.85	0.58
1:A:2362:SER:CB	1:A:2368:THR:HG22	2.34	0.58
2:B:53:LEU:HD11	2:B:128:GLY:HA2	1.84	0.58
1:A:155:ASP:HB3	1:A:1146:ILE:HD13	1.86	0.58
1:A:1180:ASP:HB2	1:A:1190:ASN:ND2	2.18	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1264:TRP:HE3	1:A:1345:VAL:HG12	1.69	0.58
1:A:1394:TYR:HD1	1:A:1474:ILE:HG22	1.69	0.58
1:A:1965:PRO:CD	1:A:1996:TRP:HB2	2.28	0.58
1:A:2372:TYR:O	1:A:2393:SER:HA	2.02	0.58
3:C:141:ASP:O	3:C:142:LYS:HD3	2.02	0.58
3:C:165:ARG:HG3	3:C:417:ILE:HG22	1.84	0.58
1:A:665:ALA:HB2	1:A:1001:GLN:NE2	2.18	0.58
1:A:1120:TYR:CE2	1:A:1122:LEU:HB3	2.39	0.58
1:A:1359:LEU:HD21	1:A:1508:LEU:HD23	1.86	0.58
1:A:192:ASN:ND2	3:C:252:ASN:OD1	2.26	0.58
1:A:942:GLU:OE2	1:A:1213:TRP:NE1	2.35	0.58
1:A:2094:ARG:NH1	1:A:2145:LYS:HB2	2.18	0.58
2:B:31:ASN:O	2:B:35:ILE:HG12	2.03	0.58
1:A:348:GLN:HG3	1:A:519:VAL:HG23	1.85	0.58
1:A:1394:TYR:CD1	1:A:1474:ILE:HG22	2.39	0.58
1:A:2187:LEU:O	1:A:2187:LEU:HD13	2.03	0.58
1:A:2335:LEU:HD23	1:A:2346:LEU:HA	1.84	0.58
3:C:92:ARG:O	3:C:125:THR:HG22	2.04	0.58
1:A:1097:SER:HA	1:A:1100:GLU:HG3	1.85	0.58
1:A:1384:ARG:HD2	1:A:1487:MET:SD	2.44	0.58
1:A:1780:LEU:HD23	1:A:1825:LEU:CB	2.33	0.58
1:A:2203:GLN:OE1	1:A:2254:ARG:NH2	2.32	0.58
1:A:1642:VAL:HG13	1:A:1662:PHE:HB2	1.85	0.58
3:C:247:ILE:O	3:C:257:ILE:HD13	2.04	0.58
1:A:579:LEU:HD12	1:A:583:PHE:CE2	2.39	0.57
1:A:912:THR:HG22	1:A:959:THR:O	2.04	0.57
1:A:2264:ARG:NH2	3:C:105:SER:O	2.37	0.57
1:A:488:VAL:CG1	1:A:498:ILE:HG12	2.34	0.57
1:A:876:TRP:CE3	1:A:990:ILE:HG22	2.39	0.57
1:A:1023:ALA:O	1:A:1024:THR:OG1	2.20	0.57
1:A:1535:VAL:HG22	1:A:1568:THR:CG2	2.34	0.57
1:A:1594:VAL:HG13	1:A:1629:ILE:HG23	1.86	0.57
1:A:1601:PRO:HA	1:A:1604:GLN:HE22	1.68	0.57
1:A:2027:LEU:HB3	1:A:2184:TYR:CD1	2.39	0.57
1:A:2071:MET:HE1	1:A:2245:LEU:HB3	1.87	0.57
1:A:2226:LYS:NZ	2:B:124:THR:HG21	2.19	0.57
1:A:1624:ILE:O	1:A:1625:ARG:HG3	2.03	0.57
1:A:144:GLU:HG3	1:A:174:ARG:HG3	1.87	0.57
1:A:229:LEU:HD23	1:A:229:LEU:H	1.68	0.57
1:A:244:LYS:HG3	1:A:256:GLY:O	2.04	0.57
1:A:366:ILE:HG21	1:A:372:PHE:CE1	2.39	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:830:ASN:O	1:A:1527:THR:HA	2.05	0.57
1:A:2113:PRO:HG2	1:A:2141:ILE:CG2	2.34	0.57
3:C:34:LYS:NZ	3:C:354:MET:HB3	2.18	0.57
1:A:297:TYR:HB3	1:A:381:THR:HG23	1.86	0.57
1:A:589:ASN:HB3	1:A:593:ASP:OD1	2.04	0.57
1:A:872:SER:HB3	1:A:992:ARG:HH12	1.69	0.57
1:A:1038:GLU:HB3	1:A:1168:MET:O	2.04	0.57
1:A:2367:LEU:HA	1:A:2398:ARG:O	2.05	0.57
1:A:332:VAL:CG2	1:A:1074:LEU:HD11	2.34	0.57
1:A:1360:LYS:HB3	1:A:1424:ASP:HA	1.85	0.57
1:A:1826:ASN:ND2	3:C:86:PRO:HG3	2.19	0.57
1:A:1842:ALA:HB2	1:A:1886:THR:HG22	1.86	0.57
1:A:2147:ASN:OD1	1:A:2233:ASN:HB3	2.04	0.57
3:C:51:LEU:HA	3:C:152:VAL:CG1	2.34	0.57
1:A:764:HIS:CD2	1:A:766:ILE:HG13	2.39	0.57
1:A:1341:ASP:OD2	1:A:1343:ARG:NH1	2.35	0.57
1:A:1963:TYR:CE2	1:A:1965:PRO:HG2	2.40	0.57
1:A:2251:PRO:HB2	1:A:2254:ARG:HB2	1.85	0.57
1:A:2348:ALA:HA	1:A:2382:ILE:HD11	1.87	0.57
1:A:1969:PHE:HD2	1:A:1970:LEU:HG	1.70	0.57
1:A:2071:MET:HE2	1:A:2245:LEU:HD23	1.87	0.57
1:A:2136:ASN:OD1	1:A:2144:THR:HB	2.04	0.57
1:A:2202:LEU:HD23	1:A:2255:MET:CB	2.35	0.57
3:C:219:ILE:HD11	3:C:222:GLN:NE2	2.18	0.57
1:A:155:ASP:HB3	1:A:1146:ILE:CD1	2.35	0.57
1:A:1378:GLU:CB	1:A:1494:ALA:HB2	2.35	0.57
1:A:1785:THR:CG2	1:A:1820:ALA:HB3	2.34	0.57
1:A:2113:PRO:O	1:A:2140:PRO:HA	2.04	0.57
3:C:199:LEU:HD12	3:C:211:LYS:HB3	1.86	0.57
1:A:355:VAL:HG22	1:A:363:VAL:HG21	1.87	0.56
1:A:857:TYR:HD1	1:A:1509:ARG:HB3	1.70	0.56
1:A:1007:ILE:HG12	1:A:1259:LEU:CD2	2.35	0.56
1:A:1090:VAL:C	1:A:1139:GLU:HG2	2.26	0.56
1:A:1380:VAL:HG22	1:A:1491:LYS:O	2.04	0.56
1:A:1433:MET:CE	1:A:1474:ILE:HG23	2.34	0.56
1:A:1560:ASP:HB2	1:A:1596:THR:OG1	2.05	0.56
1:A:1602:PHE:HB3	1:A:1627:ARG:HH12	1.70	0.56
1:A:2301:LYS:NZ	3:C:262:ASP:O	2.25	0.56
1:A:348:GLN:HG3	1:A:519:VAL:CG2	2.34	0.56
1:A:543:LEU:HD13	1:A:544:ASN:N	2.21	0.56
1:A:611:ASP:HB2	1:A:616:ARG:HB2	1.87	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1513:LEU:HD11	1:A:1553:ALA:HB3	1.86	0.56
1:A:1601:PRO:HB2	1:A:1674:TYR:CD1	2.39	0.56
1:A:2078:PRO:O	1:A:2084:SER:HA	2.05	0.56
1:A:2151:LEU:HD13	1:A:2277:MET:CE	2.36	0.56
2:B:122:LEU:HD11	2:B:133:ILE:HG21	1.87	0.56
3:C:27:VAL:HG23	3:C:147:SER:O	2.05	0.56
3:C:38:PHE:HB3	3:C:49:PHE:HZ	1.70	0.56
1:A:381:THR:O	1:A:466:TYR:OH	2.15	0.56
1:A:765:LYS:HD3	1:A:771:VAL:HG12	1.87	0.56
1:A:1587:ASN:HB3	1:A:1638:ASN:OD1	2.05	0.56
1:A:226:SER:HB3	3:C:281:ASN:ND2	2.19	0.56
1:A:489:THR:OG1	1:A:497:ALA:HB3	2.06	0.56
1:A:619:PHE:HD2	1:A:624:PRO:HG3	1.70	0.56
1:A:1052:LEU:HA	1:A:1058:MET:HE3	1.87	0.56
1:A:1334:GLY:O	1:A:1500:LYS:HD3	2.05	0.56
1:A:1361:MET:SD	1:A:1383:ILE:HD11	2.45	0.56
1:A:2091:ARG:HG3	1:A:2094:ARG:HH21	1.71	0.56
1:A:2374:ASP:HB2	1:A:2392:ARG:HB2	1.87	0.56
1:A:755:ARG:HH21	1:A:779:MET:HG3	1.71	0.56
1:A:865:GLN:HG3	1:A:1260:VAL:CG2	2.35	0.56
1:A:2033:MET:CE	1:A:2176:PRO:HG2	2.35	0.56
1:A:2350:GLN:HB3	1:A:2352:ILE:CD1	2.35	0.56
3:C:92:ARG:HD2	3:C:126:GLN:HG2	1.87	0.56
1:A:624:PRO:O	1:A:628:LEU:HB3	2.06	0.56
1:A:1062:GLN:HG2	1:A:1067:ASP:OD1	2.06	0.56
1:A:2171:ILE:HD11	1:A:2240:MET:SD	2.46	0.56
3:C:368:ASP:CB	3:C:372:ASN:HB2	2.35	0.56
1:A:1643:ARG:CG	1:A:1661:THR:HG22	2.35	0.56
1:A:2205:ASN:HB2	1:A:2250:SER:HB3	1.88	0.56
1:A:1009:PHE:HD2	1:A:1011:VAL:HG23	1.71	0.56
1:A:1533:ALA:HA	1:A:1569:ASN:O	2.05	0.56
1:A:1585:PRO:HD3	1:A:1641:GLY:O	2.05	0.56
1:A:1655:TYR:O	1:A:1657:ILE:HG22	2.05	0.56
1:A:1876:ILE:O	1:A:1959:VAL:HA	2.06	0.56
1:A:2001:GLN:HE22	1:A:2049:PRO:HD3	1.71	0.56
1:A:884:ILE:HD13	1:A:890:ASN:HD21	1.71	0.56
1:A:918:TYR:CE1	1:A:937:ARG:HB2	2.40	0.56
1:A:2117:ASP:OD1	1:A:2120:ASN:HB3	2.06	0.56
1:A:2226:LYS:HG3	2:B:124:THR:HG22	1.86	0.56
2:B:142:ILE:HG12	2:B:143:GLN:O	2.06	0.56
3:C:87:LYS:HD2	3:C:95:ASP:OD2	2.06	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
3:C:192:PRO:HB2	3:C:223:LEU:HD21	1.88	0.56
1:A:1191:TYR:OH	1:A:1224:GLN:NE2	2.38	0.55
1:A:1358:LYS:HB2	1:A:1511:ALA:HB2	1.87	0.55
1:A:1690:TYR:CE2	1:A:1692:TYR:HB2	2.41	0.55
1:A:2132:VAL:HG11	1:A:2232:THR:OG1	2.07	0.55
1:A:2283:LEU:HD12	1:A:2283:LEU:O	2.06	0.55
1:A:348:GLN:CD	1:A:365:VAL:HG21	2.27	0.55
1:A:428:LEU:CD2	1:A:459:ILE:HD12	2.36	0.55
1:A:1675:GLU:HA	1:A:1745:ARG:CG	2.36	0.55
1:A:154:GLN:HG2	1:A:2388:LEU:HD21	1.88	0.55
1:A:1769:GLY:HA2	1:A:1782:TYR:O	2.06	0.55
1:A:2151:LEU:HA	1:A:2154:ALA:HB3	1.88	0.55
1:A:364:VAL:HG21	1:A:373:PHE:CZ	2.42	0.55
1:A:375:ASN:HD22	1:A:385:ASN:HA	1.70	0.55
1:A:548:THR:HG22	1:A:552:PRO:CA	2.36	0.55
1:A:1359:LEU:HD23	1:A:1510:LEU:HD23	1.88	0.55
1:A:1572:LEU:HA	1:A:1575:LEU:CD2	2.37	0.55
1:A:1588:TYR:OH	1:A:1590:ILE:HD11	2.06	0.55
1:A:1742:GLN:O	1:A:1756:PRO:HA	2.06	0.55
1:A:156:ASN:O	1:A:164:ARG:NH1	2.39	0.55
1:A:881:THR:HG22	1:A:987:PHE:HZ	1.71	0.55
1:A:1778:LEU:HD23	1:A:1827:TYR:HD1	1.70	0.55
1:A:2155:PHE:CE2	1:A:2245:LEU:HD13	2.41	0.55
1:A:2283:LEU:HD22	1:A:2338:TYR:CE1	2.41	0.55
1:A:151:TYR:CE1	1:A:165:SER:HB2	2.42	0.55
1:A:157:PRO:HB2	1:A:1153:SER:H	1.72	0.55
1:A:1394:TYR:OH	1:A:1605:ASP:OD2	2.19	0.55
1:A:2119:ASN:O	1:A:2121:PRO:HD3	2.06	0.55
3:C:62:LEU:HD21	3:C:305:TYR:CE2	2.41	0.55
3:C:254:VAL:HG12	3:C:268:LEU:CD2	2.36	0.55
1:A:422:ALA:HB2	1:A:512:LEU:HD12	1.89	0.55
1:A:1580:TRP:HB3	1:A:1582:ILE:HD12	1.89	0.55
1:A:1601:PRO:HB2	1:A:1674:TYR:CG	2.42	0.55
1:A:1853:GLN:O	1:A:1874:ASN:HA	2.07	0.55
1:A:2152:LEU:HD11	1:A:2210:TYR:OH	2.07	0.55
1:A:229:LEU:HD21	3:C:385:GLN:HB2	1.88	0.55
1:A:762:ILE:H	1:A:774:GLY:HA3	1.70	0.55
1:A:777:LEU:HB3	1:A:1549:LEU:HD11	1.87	0.55
3:C:167:ARG:HB2	3:C:228:ASP:OD2	2.07	0.55
3:C:201:LEU:HD22	3:C:205:ASN:O	2.06	0.55
3:C:234:TRP:CZ2	3:C:376:GLU:HB2	2.41	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:323:VAL:HG22	1:A:462:VAL:CG1	2.35	0.55
1:A:1203:LEU:HD11	1:A:1209:THR:CG2	2.35	0.55
1:A:1764:PHE:CD2	1:A:1813:ILE:HD12	2.42	0.55
1:A:2263:LEU:O	1:A:2265:VAL:HG23	2.07	0.55
3:C:92:ARG:HG3	3:C:125:THR:CG2	2.37	0.55
3:C:308:VAL:HG12	3:C:353:VAL:O	2.07	0.55
1:A:162:ARG:HH22	1:A:920:SER:HB3	1.71	0.54
1:A:1078:PHE:CZ	1:A:1157:PRO:HA	2.42	0.54
1:A:1640:ILE:HD12	1:A:1641:GLY:N	2.22	0.54
1:A:162:ARG:HG2	1:A:916:VAL:HG22	1.89	0.54
1:A:280:ASP:OD1	1:A:679:ARG:HD3	2.07	0.54
1:A:492:ASN:O	1:A:496:GLN:HG3	2.06	0.54
1:A:537:LYS:H	1:A:537:LYS:HD2	1.73	0.54
1:A:1192:ILE:HG13	1:A:1216:PHE:CE1	2.42	0.54
1:A:1577:PRO:HB2	1:A:1580:TRP:HD1	1.72	0.54
3:C:343:ASN:ND2	3:C:350:GLU:OE2	2.40	0.54
1:A:341:LEU:HD12	1:A:341:LEU:O	2.07	0.54
1:A:836:GLU:O	1:A:1521:ALA:HA	2.07	0.54
1:A:931:SER:HB2	1:A:1203:LEU:HB3	1.90	0.54
1:A:1119:THR:OG1	1:A:1134:ASN:HB2	2.08	0.54
1:A:2341:TYR:CE2	1:A:2343:ASN:HB2	2.43	0.54
3:C:317:PHE:HB2	3:C:379:ILE:HD13	1.88	0.54
1:A:324:TRP:HB3	1:A:344:ILE:HD11	1.90	0.54
1:A:503:LEU:O	1:A:503:LEU:HD23	2.08	0.54
1:A:1541:LYS:HG2	1:A:1562:GLN:HG2	1.89	0.54
1:A:1768:TYR:CZ	1:A:1970:LEU:HD23	2.42	0.54
1:A:781:GLU:HG3	1:A:795:VAL:HG22	1.89	0.54
1:A:1195:ILE:HD13	1:A:1212:ARG:HH22	1.72	0.54
3:C:312:LEU:HD21	3:C:379:ILE:HG12	1.88	0.54
1:A:1085:ARG:HD2	1:A:1144:VAL:HG13	1.90	0.54
1:A:1306:PRO:HG2	1:A:1309:VAL:CG2	2.38	0.54
1:A:1644:LYS:HD3	1:A:1658:GLU:OE2	2.07	0.54
1:A:291:HIS:HB3	1:A:524:MET:CE	2.37	0.54
1:A:428:LEU:HA	1:A:1167:THR:HG21	1.90	0.54
1:A:1831:ILE:HG22	1:A:1837:PHE:CB	2.38	0.54
1:A:2152:LEU:HD23	1:A:2279:PHE:CZ	2.41	0.54
1:A:457:ASP:OD2	1:A:1235:SER:HB2	2.07	0.54
1:A:548:THR:HG22	1:A:552:PRO:HA	1.89	0.54
1:A:834:ARG:NH1	3:C:419:ASN:O	2.32	0.54
1:A:1016:VAL:O	1:A:1020:GLU:HB2	2.08	0.54
3:C:311:THR:HG23	3:C:348:VAL:CG1	2.37	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:865:GLN:HG3	1:A:1260:VAL:HG21	1.88	0.54
1:A:1032:ASN:OD1	1:A:1176:GLU:HG2	2.08	0.54
1:A:1484:ARG:HG3	1:A:1485:ASN:OD1	2.07	0.54
1:A:155:ASP:OD2	1:A:2387:PRO:HG2	2.09	0.54
1:A:390:PRO:HA	1:A:393:ILE:CD1	2.38	0.54
1:A:668:LEU:O	1:A:668:LEU:HD13	2.07	0.54
1:A:883:PHE:CZ	1:A:894:ALA:HB2	2.43	0.54
1:A:1876:ILE:HG21	1:A:1979:PHE:HE2	1.72	0.54
1:A:2329:LEU:CD2	1:A:2353:TRP:HB3	2.39	0.54
1:A:2352:ILE:HD12	1:A:2352:ILE:H	1.73	0.54
3:C:73:ILE:HD11	3:C:119:PHE:CE1	2.43	0.54
1:A:924:GLY:HA3	1:A:1131:ARG:HH21	1.72	0.53
2:B:62:SER:OG	2:B:137:LYS:HD2	2.08	0.53
1:A:144:GLU:HB3	1:A:2398:ARG:CG	2.38	0.53
1:A:365:VAL:HG11	1:A:423:THR:O	2.09	0.53
1:A:866:SER:O	1:A:1261:ARG:HG2	2.08	0.53
1:A:943:LEU:HD11	1:A:1213:TRP:CE3	2.44	0.53
1:A:1064:LEU:O	1:A:1064:LEU:HD13	2.08	0.53
1:A:1361:MET:HB3	1:A:1508:LEU:HA	1.90	0.53
1:A:2024:LEU:HD12	1:A:2027:LEU:HD23	1.89	0.53
1:A:2027:LEU:HB3	1:A:2184:TYR:HD1	1.73	0.53
1:A:1526:ASP:OD2	3:C:167:ARG:NH2	2.41	0.53
1:A:153:LYS:HB3	1:A:165:SER:HA	1.91	0.53
1:A:419:VAL:HG12	1:A:424:ASP:OD2	2.09	0.53
1:A:1177:TYR:HB3	1:A:1218:ILE:HG21	1.90	0.53
1:A:1499:ILE:HD12	1:A:1499:ILE:H	1.74	0.53
1:A:1663:SER:HB2	1:A:1687:ALA:CB	2.32	0.53
1:A:1738:GLN:N	1:A:1761:ASN:O	2.42	0.53
1:A:2032:SER:O	1:A:2178:PRO:HA	2.08	0.53
2:B:146:VAL:HG12	2:B:147:PRO:O	2.09	0.53
3:C:335:SER:HB2	3:C:336:PRO:HD2	1.91	0.53
1:A:348:GLN:NE2	1:A:365:VAL:HG21	2.23	0.53
1:A:1097:SER:HB3	1:A:1139:GLU:OE1	2.09	0.53
1:A:1356:TYR:CD1	1:A:1513:LEU:HB3	2.43	0.53
1:A:1361:MET:HA	1:A:1507:GLU:O	2.07	0.53
1:A:1739:SER:HB2	1:A:1806:ILE:HG12	1.91	0.53
1:A:1768:TYR:OH	1:A:1970:LEU:HA	2.08	0.53
3:C:87:LYS:HA	3:C:90:TYR:CE1	2.44	0.53
1:A:1673:ASP:OD1	1:A:1676:VAL:HG12	2.09	0.53
1:A:1682:GLU:OE2	1:A:1806:ILE:HD13	2.09	0.53
1:A:1789:ILE:O	1:A:1814:GLY:HA3	2.08	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1876:ILE:HD11	1:A:1963:TYR:CD2	2.43	0.53
1:A:2320:ASP:HB3	1:A:2362:SER:OG	2.09	0.53
1:A:345:ILE:HG13	1:A:502:SER:HB3	1.91	0.53
1:A:899:LEU:O	1:A:899:LEU:HD23	2.08	0.53
1:A:1829:ILE:HB	1:A:1842:ALA:O	2.09	0.53
1:A:454:LEU:CD1	1:A:458:GLU:HB2	2.39	0.53
1:A:2329:LEU:HD13	1:A:2330:ARG:N	2.24	0.53
2:B:144:LEU:O	2:B:167:ILE:HA	2.09	0.53
3:C:70:TYR:HB2	3:C:138:LEU:CD1	2.39	0.53
1:A:227:MET:SD	1:A:777:LEU:HD21	2.49	0.53
1:A:902:GLY:O	1:A:973:ASN:ND2	2.34	0.53
1:A:905:ARG:HD3	1:A:971:PRO:HG2	1.90	0.53
1:A:964:TYR:OH	1:A:986:ASN:O	2.27	0.53
1:A:987:PHE:CB	1:A:1244:THR:HG22	2.38	0.53
1:A:1048:TYR:CE2	1:A:1092:LEU:HA	2.44	0.53
1:A:1385:PHE:HB3	1:A:1486:LEU:HD23	1.91	0.53
1:A:2139:TYR:HB3	1:A:2140:PRO:HD2	1.90	0.53
1:A:162:ARG:NH2	1:A:920:SER:HB3	2.24	0.53
1:A:260:GLU:C	1:A:756:ARG:HA	2.29	0.53
1:A:1076:TYR:HD1	1:A:1159:VAL:HG11	1.74	0.53
1:A:2201:SER:HB3	1:A:2256:ASP:OD1	2.09	0.53
1:A:147:LEU:HD23	1:A:147:LEU:H	1.74	0.52
1:A:334:THR:HB	1:A:2276:SER:OG	2.08	0.52
1:A:512:LEU:HD11	1:A:1035:GLU:OE1	2.08	0.52
1:A:574:VAL:HG11	1:A:633:LEU:HD21	1.90	0.52
1:A:574:VAL:HG23	1:A:632:LYS:HG2	1.90	0.52
1:A:886:SER:CA	1:A:1227:ILE:HG23	2.39	0.52
1:A:925:ILE:HD13	1:A:1128:VAL:CG2	2.39	0.52
1:A:1015:TYR:OH	1:A:1025:ASN:HB2	2.09	0.52
1:A:1027:GLY:HA2	1:A:1246:PHE:HE1	1.75	0.52
1:A:1534:THR:OG1	1:A:1569:ASN:HB2	2.09	0.52
1:A:1960:LEU:HD23	1:A:2007:PHE:CD1	2.44	0.52
1:A:2067:ILE:CD1	1:A:2069:THR:HB	2.39	0.52
1:A:288:ASN:HB2	1:A:453:ARG:NH2	2.24	0.52
1:A:340:ASN:HB3	1:A:2278:SER:HB2	1.91	0.52
1:A:867:THR:HB	1:A:1258:ASP:OD2	2.10	0.52
1:A:1181:VAL:HA	1:A:1185:MET:CE	2.40	0.52
1:A:1364:HIS:CE1	1:A:1416:VAL:HG13	2.45	0.52
1:A:1623:ASN:O	1:A:1627:ARG:HG2	2.09	0.52
1:A:2220:ASP:HB3	1:A:2235:TYR:CE2	2.43	0.52
1:A:211:PRO:HG3	1:A:217:ILE:CG2	2.40	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:662:ASN:ND2	1:A:667:ALA:HB2	2.24	0.52
1:A:857:TYR:CD1	1:A:1509:ARG:HB3	2.44	0.52
1:A:1004:VAL:HA	1:A:1261:ARG:HA	1.92	0.52
1:A:1189:GLU:CB	1:A:1192:ILE:HD13	2.29	0.52
1:A:1241:MET:HE1	1:A:1257:LEU:HD11	1.92	0.52
1:A:1400:LEU:HA	1:A:1421:ASN:OD1	2.08	0.52
3:C:70:TYR:HB2	3:C:138:LEU:HD12	1.91	0.52
1:A:801:GLY:HA3	1:A:838:ALA:HA	1.91	0.52
1:A:992:ARG:HG2	1:A:993:ALA:H	1.75	0.52
1:A:1635:LYS:O	1:A:1635:LYS:HD3	2.10	0.52
3:C:77:ASP:O	3:C:132:ASN:ND2	2.39	0.52
3:C:110:GLN:HB2	3:C:263:ILE:HG21	1.91	0.52
3:C:215:PRO:HB3	3:C:225:TYR:HE1	1.75	0.52
1:A:395:GLN:HE22	2:B:94:ASN:HB3	1.74	0.52
1:A:527:VAL:CG2	1:A:618:ILE:HG12	2.29	0.52
1:A:764:HIS:HD2	1:A:766:ILE:HG13	1.75	0.52
1:A:2078:PRO:HB2	1:A:2083:GLN:HE22	1.75	0.52
1:A:214:ASP:OD2	1:A:216:ILE:HG22	2.08	0.52
1:A:338:GLY:HA3	1:A:2242:ASN:ND2	2.25	0.52
1:A:365:VAL:HG22	1:A:518:PRO:CD	2.39	0.52
1:A:931:SER:CB	1:A:1204:PRO:HD2	2.40	0.52
1:A:1009:PHE:CD2	1:A:1011:VAL:HG23	2.45	0.52
1:A:1872:LEU:HD12	1:A:2003:PHE:CE1	2.44	0.52
1:A:2016:LYS:HA	1:A:2033:MET:O	2.10	0.52
3:C:165:ARG:HG3	3:C:417:ILE:CG2	2.39	0.52
1:A:317:GLN:NE2	1:A:444:GLN:OE1	2.42	0.52
1:A:399:PHE:O	1:A:415:ASN:HB2	2.10	0.52
1:A:932:LEU:HB2	1:A:1018:ASN:O	2.09	0.52
1:A:2155:PHE:HE2	1:A:2245:LEU:HD13	1.75	0.52
3:C:139:ASN:HB3	3:C:145:VAL:CG2	2.40	0.52
3:C:342:TYR:HA	3:C:349:PHE:HD1	1.75	0.52
1:A:546:LEU:HD23	1:A:554:ASN:HB3	1.91	0.52
1:A:961:ASP:OD1	1:A:1253:ARG:HG2	2.10	0.52
1:A:999:PHE:HB2	1:A:1233:PHE:HB3	1.92	0.52
1:A:1138:THR:HA	1:A:1141:ASN:ND2	2.24	0.52
1:A:1156:LEU:HD23	1:A:2384:THR:HG22	1.91	0.52
1:A:1194:ASP:CG	1:A:1298:LYS:HA	2.30	0.52
1:A:1617:ASP:OD2	1:A:1619:ALA:HB3	2.10	0.52
1:A:1725:LEU:HB3	1:A:1726:PRO:HD2	1.92	0.52
1:A:814:THR:HA	1:A:1530:ALA:HB2	1.92	0.52
1:A:1264:TRP:CE3	1:A:1345:VAL:HG12	2.45	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1823:LEU:O	1:A:1847:THR:HA	2.10	0.52
1:A:1947:ASN:HD22	1:A:2020:ASN:HD22	1.57	0.52
1:A:2268:GLU:OE1	1:A:2270:LYS:HE3	2.09	0.52
1:A:2329:LEU:HD23	1:A:2353:TRP:HB3	1.92	0.52
2:B:57:ILE:HD11	2:B:135:LEU:HD23	1.92	0.52
3:C:34:LYS:HZ2	3:C:354:MET:HB3	1.74	0.52
1:A:217:ILE:HG13	1:A:247:LEU:HD22	1.92	0.51
1:A:441:PHE:CE2	1:A:443:PRO:HB3	2.45	0.51
2:B:37:ASP:O	2:B:41:GLN:HG3	2.10	0.51
1:A:155:ASP:HA	1:A:164:ARG:HH22	1.74	0.51
1:A:460:LEU:HD12	1:A:508:LEU:HB2	1.92	0.51
1:A:1120:TYR:HB2	1:A:1150:ASN:ND2	2.25	0.51
1:A:1358:LYS:HB2	1:A:1511:ALA:HB3	1.91	0.51
1:A:1380:VAL:HG23	1:A:1491:LYS:HB3	1.92	0.51
1:A:1542:SER:HB3	1:A:1561:VAL:HG22	1.92	0.51
1:A:1566:ILE:O	1:A:1589:ALA:HA	2.09	0.51
1:A:1764:PHE:CE2	1:A:1813:ILE:HD12	2.46	0.51
1:A:1766:TYR:O	1:A:1785:THR:HA	2.10	0.51
1:A:1829:ILE:HG22	1:A:1831:ILE:CG1	2.40	0.51
1:A:2205:ASN:HD22	1:A:2251:PRO:HD2	1.75	0.51
1:A:2362:SER:CA	1:A:2368:THR:HG22	2.40	0.51
3:C:74:THR:HG22	3:C:75:HIS:O	2.11	0.51
2:B:39:LEU:O	2:B:39:LEU:HD23	2.10	0.51
3:C:178:LEU:HD23	3:C:200:LEU:CD2	2.36	0.51
3:C:210:ILE:HG22	3:C:213:ILE:HD11	1.93	0.51
1:A:585:LEU:HD11	1:A:602:PHE:HE1	1.75	0.51
1:A:588:LEU:CD1	1:A:605:ILE:HD11	2.41	0.51
1:A:1193:THR:HG21	1:A:1217:LYS:HD3	1.92	0.51
1:A:2001:GLN:HE22	1:A:2049:PRO:CD	2.23	0.51
1:A:2084:SER:OG	1:A:2087:PHE:HB3	2.11	0.51
1:A:2196:LYS:H	1:A:2196:LYS:HD2	1.76	0.51
3:C:393:LEU:HD23	3:C:409:LYS:HB3	1.93	0.51
1:A:364:VAL:HG21	1:A:373:PHE:HZ	1.75	0.51
1:A:907:LYS:HB2	1:A:970:GLY:HA2	1.92	0.51
1:A:1380:VAL:HA	1:A:1398:ILE:O	2.10	0.51
1:A:1682:GLU:OE1	1:A:1682:GLU:N	2.44	0.51
1:A:1818:GLN:HA	1:A:1852:TRP:O	2.09	0.51
1:A:2370:ILE:HD11	1:A:2396:THR:HG23	1.92	0.51
1:A:161:PRO:HD2	1:A:916:VAL:HG21	1.93	0.51
1:A:600:GLY:HA3	1:A:1757:LEU:HD13	1.93	0.51
1:A:1129:LEU:O	1:A:1129:LEU:HD13	2.10	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1508:LEU:HD23	1:A:1508:LEU:O	2.11	0.51
2:B:55:TYR:CD2	2:B:142:ILE:HD11	2.45	0.51
1:A:400:LEU:HB3	1:A:404:ILE:HG21	1.93	0.51
1:A:1195:ILE:HG23	1:A:1214:ILE:HG22	1.93	0.51
1:A:1412:SER:HB2	1:A:1413:PRO:HD2	1.92	0.51
1:A:1764:PHE:HB3	1:A:1788:ASN:OD1	2.10	0.51
1:A:2060:TYR:HB3	1:A:2219:PHE:HE1	1.74	0.51
2:B:32:GLU:O	2:B:36:VAL:HG23	2.10	0.51
2:B:39:LEU:HD11	2:B:46:ALA:HB3	1.92	0.51
1:A:146:ASP:CB	1:A:2396:THR:HG22	2.32	0.51
1:A:217:ILE:HG13	1:A:247:LEU:CD2	2.41	0.51
1:A:290:ARG:HA	1:A:450:LEU:HD21	1.91	0.51
1:A:429:GLU:HB3	1:A:1166:ASN:O	2.11	0.51
1:A:656:PHE:CD1	1:A:673:LYS:HB2	2.45	0.51
3:C:138:LEU:HA	3:C:143:GLU:O	2.10	0.51
1:A:315:ARG:NH1	1:A:2002:ASP:HA	2.26	0.51
1:A:908:LEU:CD1	1:A:990:ILE:HD11	2.40	0.51
1:A:1470:LEU:O	1:A:1471:THR:OG1	2.27	0.51
1:A:1570:LEU:HD12	1:A:1586:PHE:CD2	2.46	0.51
1:A:1974:LYS:HB3	1:A:1975:PRO:HD3	1.93	0.51
1:A:441:PHE:HE2	1:A:443:PRO:HB3	1.76	0.51
1:A:512:LEU:HD21	1:A:1035:GLU:OE1	2.11	0.51
1:A:1052:LEU:HD13	1:A:1094:GLY:HA2	1.91	0.51
1:A:1117:ASP:O	1:A:1137:GLY:HA3	2.10	0.51
1:A:1594:VAL:HG13	1:A:1629:ILE:CG2	2.41	0.51
3:C:73:ILE:HD11	3:C:119:PHE:HE1	1.76	0.51
3:C:227:TYR:HE2	3:C:230:GLU:HB2	1.75	0.51
1:A:1013:ASP:CB	1:A:1212:ARG:HB2	2.41	0.50
1:A:1046:LYS:HB3	1:A:1068:VAL:HG11	1.93	0.50
1:A:1353:MET:CE	1:A:1483:VAL:HG11	2.41	0.50
1:A:1516:LYS:O	1:A:1556:ARG:NH1	2.44	0.50
1:A:1567:VAL:HG12	3:C:217:TYR:CD1	2.46	0.50
1:A:1679:TYR:HD1	1:A:1742:GLN:HG2	1.76	0.50
3:C:23:ILE:HG22	3:C:25:THR:HG23	1.93	0.50
3:C:23:ILE:O	3:C:82:PRO:HD3	2.11	0.50
3:C:202:GLN:HG3	3:C:390:TYR:HE1	1.76	0.50
1:A:282:TYR:HB3	1:A:674:ASN:ND2	2.25	0.50
1:A:1342:SER:HB3	1:A:1491:LYS:HG3	1.92	0.50
1:A:1391:GLN:O	1:A:1476:GLY:HA3	2.11	0.50
1:A:226:SER:HB3	3:C:281:ASN:HD22	1.77	0.50
1:A:600:GLY:CA	1:A:1757:LEU:HD13	2.41	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1120:TYR:HB2	1:A:1150:ASN:HD22	1.75	0.50
1:A:1163:ASN:ND2	1:A:1165:ASP:OD2	2.45	0.50
1:A:1774:LEU:CD2	1:A:1780:LEU:HD12	2.41	0.50
1:A:1841:LYS:HD3	1:A:1887:THR:HB	1.94	0.50
1:A:1880:ASN:OD1	1:A:1956:SER:OG	2.28	0.50
1:A:2362:SER:HA	1:A:2368:THR:HA	1.92	0.50
1:A:2374:ASP:OD2	1:A:2392:ARG:HD2	2.12	0.50
1:A:343:ASN:HB2	1:A:502:SER:HA	1.93	0.50
1:A:799:ILE:HD11	1:A:840:LEU:HD12	1.94	0.50
1:A:865:GLN:HB2	1:A:1289:ALA:HB3	1.93	0.50
1:A:965:TYR:HB3	1:A:968:GLU:CG	2.42	0.50
1:A:809:GLU:HA	1:A:829:SER:O	2.12	0.50
1:A:964:TYR:CE2	1:A:966:PRO:HB3	2.47	0.50
1:A:1290:VAL:O	1:A:1326:GLN:HB2	2.12	0.50
3:C:36:VAL:HG22	3:C:59:PHE:HB2	1.93	0.50
3:C:117:LEU:O	3:C:117:LEU:HD12	2.12	0.50
1:A:199:PHE:CE2	3:C:285:VAL:HG11	2.47	0.50
1:A:207:LEU:O	1:A:221:GLU:HA	2.12	0.50
1:A:407:ILE:HG13	1:A:427:VAL:CG1	2.42	0.50
1:A:1344:ALA:HA	1:A:1489:GLY:CA	2.41	0.50
1:A:1592:GLU:HB3	1:A:1633:LYS:HB3	1.94	0.50
1:A:2324:LYS:HE2	3:C:106:PHE:HD2	1.77	0.50
2:B:111:PHE:HB2	2:B:159:THR:CG2	2.39	0.50
1:A:327:ASN:HB2	1:A:430:ASN:O	2.12	0.50
1:A:1479:ASN:OD1	1:A:1604:GLN:HB2	2.12	0.50
1:A:1947:ASN:HB2	1:A:2020:ASN:ND2	2.25	0.50
1:A:2090:PHE:HB2	1:A:2158:ALA:CB	2.42	0.50
1:A:1630:ASP:OD1	1:A:1673:ASP:HA	2.12	0.50
1:A:1768:TYR:CD2	1:A:1784:ALA:HB3	2.47	0.50
3:C:90:TYR:CB	3:C:129:LEU:HD12	2.40	0.50
3:C:169:LEU:O	3:C:172:ILE:HG22	2.11	0.50
3:C:321:LYS:HG2	3:C:368:ASP:O	2.12	0.50
1:A:182:LYS:HA	1:A:188:GLU:HA	1.94	0.50
1:A:220:VAL:HG13	1:A:245:THR:HG22	1.94	0.50
1:A:279:PHE:CE1	1:A:680:GLY:HA3	2.46	0.50
1:A:2034:ASP:O	1:A:2067:ILE:HA	2.11	0.50
1:A:2286:GLU:O	1:A:2334:THR:HA	2.12	0.50
3:C:37:THR:HG21	3:C:44:ASN:ND2	2.27	0.50
3:C:368:ASP:HB2	3:C:372:ASN:HB2	1.94	0.50
1:A:885:THR:HB	1:A:888:ASN:ND2	2.27	0.49
1:A:1097:SER:HA	1:A:1100:GLU:CG	2.42	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1374:LEU:HD11	1:A:1501:GLY:CA	2.42	0.49
3:C:166:THR:HG22	3:C:172:ILE:HA	1.93	0.49
3:C:312:LEU:HB3	3:C:349:PHE:HB2	1.94	0.49
1:A:320:ARG:HD3	1:A:478:PHE:CE2	2.47	0.49
1:A:372:PHE:HA	1:A:387:LYS:HD3	1.94	0.49
1:A:1036:ILE:HG13	1:A:1174:TYR:HE1	1.77	0.49
1:A:1425:LEU:HD11	1:A:1430:LEU:HD11	1.95	0.49
3:C:342:TYR:HE2	3:C:344:THR:HG22	1.77	0.49
1:A:892:PHE:CE2	1:A:904:LYS:HE2	2.47	0.49
1:A:1575:LEU:HD23	1:A:1575:LEU:H	1.76	0.49
1:A:2071:MET:CE	1:A:2245:LEU:HD23	2.41	0.49
3:C:305:TYR:CE1	3:C:356:LYS:HB2	2.43	0.49
3:C:333:SER:O	3:C:334:LEU:HD23	2.13	0.49
1:A:334:THR:HG21	1:A:2285:THR:OG1	2.13	0.49
1:A:656:PHE:CE2	1:A:659:MET:HB2	2.47	0.49
1:A:1548:SER:OG	1:A:1551:GLN:HG2	2.13	0.49
1:A:1592:GLU:HB3	1:A:1633:LYS:CB	2.42	0.49
1:A:865:GLN:HB2	1:A:1289:ALA:CB	2.42	0.49
1:A:907:LYS:HB2	1:A:970:GLY:H	1.77	0.49
1:A:1572:LEU:HB2	1:A:1584:LEU:O	2.12	0.49
1:A:1788:ASN:CB	1:A:1816:PRO:HA	2.38	0.49
3:C:33:ILE:HD13	3:C:145:VAL:CG1	2.38	0.49
3:C:215:PRO:HB3	3:C:225:TYR:CE1	2.46	0.49
3:C:279:TYR:CE1	3:C:386:THR:HG22	2.47	0.49
1:A:1116:ASP:OD1	1:A:1117:ASP:N	2.45	0.49
1:A:1291:ASN:OD1	1:A:1292:ILE:N	2.45	0.49
1:A:1403:THR:HG22	1:A:1418:MET:CE	2.41	0.49
1:A:1579:LYS:HE2	1:A:1579:LYS:HA	1.94	0.49
1:A:2009:GLN:HB2	1:A:2041:THR:CG2	2.42	0.49
3:C:156:HIS:ND1	3:C:186:ASP:OD2	2.37	0.49
1:A:465:GLU:HB2	1:A:478:PHE:CZ	2.48	0.49
1:A:1589:ALA:HB3	1:A:1636:SER:OG	2.13	0.49
3:C:85:ILE:HD11	3:C:403:TYR:CB	2.34	0.49
3:C:181:THR:HG22	3:C:224:VAL:HG22	1.94	0.49
1:A:218:GLN:HE21	1:A:248:GLN:HB3	1.77	0.49
1:A:426:SER:HB2	1:A:459:ILE:CD1	2.42	0.49
1:A:454:LEU:HD13	1:A:458:GLU:HB2	1.94	0.49
1:A:1694:PHE:N	1:A:1727:SER:O	2.46	0.49
1:A:2152:LEU:CD2	1:A:2243:VAL:HG21	2.43	0.49
1:A:2218:ASN:CG	1:A:2239:ILE:HD11	2.33	0.49
1:A:155:ASP:HB2	1:A:2387:PRO:HD2	1.95	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:211:PRO:HG3	1:A:217:ILE:HG22	1.93	0.49
1:A:216:ILE:CG2	1:A:217:ILE:HD12	2.31	0.49
1:A:574:VAL:CG2	1:A:632:LYS:HG2	2.43	0.49
1:A:913:ILE:H	1:A:913:ILE:HD12	1.78	0.49
1:A:1033:LEU:HD13	1:A:1236:ILE:HG21	1.94	0.49
1:A:1182:LYS:H	1:A:1185:MET:CE	2.26	0.49
1:A:2115:TYR:HB2	1:A:2137:GLN:O	2.13	0.49
3:C:311:THR:HG23	3:C:348:VAL:HG11	1.93	0.49
3:C:322:ASP:CG	3:C:339:LYS:HE3	2.32	0.49
1:A:288:ASN:HD22	1:A:453:ARG:NH2	2.11	0.49
1:A:342:ARG:NH1	1:A:503:LEU:HB2	2.28	0.49
1:A:364:VAL:CG1	1:A:366:ILE:HG22	2.43	0.49
1:A:549:ASP:HB3	1:A:550:PRO:HD3	1.95	0.49
1:A:558:PRO:HG3	1:A:564:PHE:CE2	2.48	0.49
1:A:582:VAL:O	1:A:632:LYS:HE3	2.13	0.49
1:A:1192:ILE:H	1:A:1192:ILE:HD12	1.78	0.49
1:A:1401:LYS:O	1:A:1421:ASN:ND2	2.43	0.49
1:A:1411:ILE:CG2	1:A:1415:LEU:HB2	2.43	0.49
1:A:1836:ILE:HG13	1:A:1837:PHE:CD1	2.47	0.49
1:A:1842:ALA:HA	1:A:1886:THR:HA	1.94	0.49
1:A:2148:GLN:NE2	1:A:2240:MET:HG2	2.25	0.49
1:A:2262:SER:O	1:A:2263:LEU:HD12	2.13	0.49
1:A:2276:SER:OG	1:A:2285:THR:OG1	2.30	0.49
3:C:245:LYS:CE	3:C:294:ILE:HD11	2.42	0.49
1:A:1203:LEU:HB3	1:A:1204:PRO:HD2	1.95	0.48
1:A:1242:PHE:HB3	1:A:1244:THR:HG23	1.93	0.48
1:A:2212:ILE:HG12	1:A:2240:MET:HE1	1.95	0.48
1:A:2212:ILE:HG23	1:A:2240:MET:HE3	1.93	0.48
1:A:2226:LYS:HG3	2:B:124:THR:CG2	2.42	0.48
3:C:47:PRO:HB3	3:C:150:PHE:HB3	1.93	0.48
3:C:50:GLU:HB2	3:C:53:SER:OG	2.12	0.48
3:C:85:ILE:CG2	3:C:89:ASP:HB3	2.43	0.48
1:A:194:ASP:H	1:A:203:ASN:ND2	2.11	0.48
1:A:827:VAL:CG2	1:A:828:PRO:HD2	2.43	0.48
1:A:873:ALA:HA	1:A:960:LEU:HD21	1.95	0.48
1:A:999:PHE:CE2	1:A:1033:LEU:HD11	2.42	0.48
1:A:1198:VAL:HG22	1:A:1211:ALA:O	2.12	0.48
1:A:2156:LEU:HD11	1:A:2210:TYR:CZ	2.49	0.48
1:A:2261:SER:O	1:A:2262:SER:OG	2.25	0.48
1:A:883:PHE:HD2	1:A:1227:ILE:HG21	1.77	0.48
1:A:1306:PRO:HA	1:A:1417:TRP:CD1	2.48	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1366:GLU:O	1:A:1374:LEU:HD12	2.13	0.48
1:A:1368:LEU:O	1:A:1371:GLN:HB2	2.13	0.48
1:A:1997:LEU:HD13	1:A:1998:THR:N	2.29	0.48
1:A:2132:VAL:O	1:A:2136:ASN:HB3	2.13	0.48
1:A:2354:SER:HA	1:A:2375:HIS:O	2.14	0.48
2:B:107:ASN:OD1	2:B:108:GLY:N	2.46	0.48
3:C:342:TYR:CZ	3:C:347:ALA:HA	2.48	0.48
1:A:448:ILE:CD1	1:A:462:VAL:HG11	2.43	0.48
1:A:589:ASN:OD1	1:A:590:TYR:N	2.43	0.48
1:A:648:ASN:HB3	1:A:651:GLN:HG2	1.95	0.48
1:A:810:VAL:CG1	1:A:813:LEU:HD12	2.42	0.48
1:A:858:VAL:HG12	1:A:1508:LEU:O	2.13	0.48
1:A:918:TYR:CD1	1:A:937:ARG:HB2	2.48	0.48
1:A:1059:VAL:HG23	1:A:1068:VAL:O	2.13	0.48
1:A:1393:PHE:C	1:A:1478:PRO:HG3	2.34	0.48
1:A:2001:GLN:HE22	1:A:2049:PRO:HG3	1.77	0.48
3:C:103:SER:O	3:C:114:HIS:N	2.45	0.48
3:C:192:PRO:CB	3:C:223:LEU:HD21	2.44	0.48
3:C:310:PHE:CE2	3:C:325:ILE:HG21	2.48	0.48
3:C:339:LYS:O	3:C:351:LYS:HD2	2.13	0.48
1:A:486:THR:HA	1:A:499:ILE:O	2.13	0.48
1:A:965:TYR:HB3	1:A:968:GLU:HG3	1.94	0.48
1:A:1232:ASP:OD1	1:A:1233:PHE:N	2.45	0.48
1:A:1326:GLN:OE1	1:A:1326:GLN:N	2.46	0.48
1:A:1854:ARG:HD2	1:A:1854:ARG:O	2.13	0.48
1:A:2346:LEU:HD21	1:A:2348:ALA:O	2.14	0.48
3:C:62:LEU:HD23	3:C:112:TYR:HB3	1.95	0.48
3:C:259:SER:HB2	3:C:264:TYR:CD1	2.48	0.48
1:A:320:ARG:NH1	1:A:2239:ILE:HG21	2.29	0.48
1:A:548:THR:HG23	1:A:677:LEU:CD2	2.44	0.48
1:A:1031:PHE:HB2	1:A:1177:TYR:HB2	1.95	0.48
1:A:1362:PHE:O	1:A:1363:LEU:HD12	2.13	0.48
1:A:2143:TYR:HB3	1:A:2150:VAL:CG2	2.44	0.48
1:A:2338:TYR:CD2	1:A:2343:ASN:HB3	2.49	0.48
3:C:137:ILE:HB	3:C:146:LEU:CD2	2.44	0.48
1:A:155:ASP:HA	1:A:164:ARG:NH2	2.29	0.48
1:A:279:PHE:CZ	1:A:680:GLY:HA3	2.48	0.48
1:A:770:PHE:HA	1:A:805:ASN:O	2.13	0.48
1:A:963:THR:HG22	1:A:965:TYR:CE1	2.49	0.48
1:A:1010:TRP:CZ3	1:A:1215:GLN:HB2	2.47	0.48
1:A:1374:LEU:HD21	1:A:1500:LYS:H	1.78	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
3:C:40:GLN:NE2	3:C:53:SER:HB3	2.29	0.48
3:C:68:ASN:HB2	3:C:140:GLU:OE1	2.14	0.48
1:A:162:ARG:HG2	1:A:916:VAL:CG2	2.44	0.48
1:A:884:ILE:CD1	1:A:890:ASN:HD21	2.27	0.48
1:A:1177:TYR:CE1	1:A:1223:PRO:HA	2.48	0.48
1:A:1492:SER:CB	1:A:1499:ILE:HD13	2.35	0.48
1:A:1666:TYR:CB	1:A:1684:SER:HA	2.43	0.48
1:A:1827:TYR:CE2	1:A:1829:ILE:HA	2.49	0.48
1:A:332:VAL:HG13	1:A:339:ASN:ND2	2.28	0.48
1:A:880:SER:H	1:A:991:MET:HE3	1.79	0.48
1:A:1106:ASN:OD1	1:A:1107:TYR:N	2.46	0.48
1:A:1351:VAL:HG13	1:A:1483:VAL:HB	1.96	0.48
1:A:1587:ASN:HD21	3:C:219:ILE:CG2	2.25	0.48
1:A:2221:TYR:CE2	1:A:2237:GLU:HB2	2.49	0.48
2:B:122:LEU:CD1	2:B:125:LEU:HD12	2.40	0.48
3:C:199:LEU:CD1	3:C:211:LYS:HB3	2.43	0.48
1:A:491:ASN:OD1	1:A:492:ASN:N	2.46	0.48
1:A:876:TRP:HB3	1:A:990:ILE:HG23	1.96	0.48
1:A:1091:GLY:HA2	1:A:1138:THR:OG1	2.14	0.48
1:A:1543:THR:HA	1:A:1560:ASP:OD1	2.14	0.48
1:A:1952:TYR:CE2	1:A:1954:LYS:HG3	2.48	0.48
1:A:2069:THR:O	1:A:2208:ALA:HB3	2.14	0.48
1:A:2115:TYR:CE2	1:A:2144:THR:HG22	2.49	0.48
3:C:137:ILE:HB	3:C:146:LEU:HD23	1.95	0.48
1:A:840:LEU:HD13	1:A:1546:PHE:O	2.13	0.47
1:A:891:THR:HA	1:A:904:LYS:HD2	1.97	0.47
1:A:940:SER:OG	1:A:955:GLN:HA	2.14	0.47
1:A:1885:THR:HG21	3:C:88:THR:HG22	1.96	0.47
1:A:2035:ARG:CG	1:A:2067:ILE:HG22	2.44	0.47
3:C:177:ASN:OD1	3:C:178:LEU:N	2.47	0.47
3:C:321:LYS:HE2	3:C:368:ASP:OD1	2.14	0.47
1:A:154:GLN:HG2	1:A:2388:LEU:CD2	2.44	0.47
1:A:174:ARG:HH12	1:A:196:GLN:HG2	1.79	0.47
1:A:211:PRO:HD2	1:A:218:GLN:O	2.14	0.47
1:A:218:GLN:HB3	3:C:278:ILE:CD1	2.44	0.47
1:A:822:ASN:HD21	1:A:1577:PRO:HA	1.78	0.47
1:A:876:TRP:HE3	1:A:990:ILE:HG22	1.78	0.47
1:A:917:PHE:O	1:A:921:LYS:HG2	2.14	0.47
1:A:969:ARG:HA	1:A:978:PHE:CZ	2.49	0.47
1:A:1429:LEU:O	1:A:1429:LEU:HD23	2.13	0.47
1:A:1785:THR:HG22	1:A:1820:ALA:HB3	1.96	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2270:LYS:O	1:A:2290:MET:HA	2.14	0.47
1:A:220:VAL:HG22	1:A:245:THR:HG22	1.97	0.47
1:A:294:LEU:HD21	1:A:448:ILE:CG1	2.41	0.47
1:A:460:LEU:CD1	1:A:508:LEU:HD12	2.45	0.47
1:A:1636:SER:HB2	1:A:1667:ASN:HD22	1.79	0.47
1:A:1760:ARG:NH2	1:A:1804:PHE:HB3	2.28	0.47
1:A:1839:PHE:HB2	1:A:1889:ASN:O	2.14	0.47
1:A:1997:LEU:HD11	1:A:2045:TYR:HE2	1.79	0.47
1:A:2324:LYS:HB3	1:A:2358:THR:OG1	2.15	0.47
2:B:136:LEU:HD23	2:B:142:ILE:HB	1.96	0.47
3:C:268:LEU:HD12	3:C:310:PHE:CD1	2.48	0.47
1:A:144:GLU:O	1:A:174:ARG:HB2	2.15	0.47
1:A:174:ARG:NH2	1:A:196:GLN:HG2	2.29	0.47
1:A:1006:TYR:CD1	1:A:1219:PRO:HA	2.48	0.47
1:A:1097:SER:HA	1:A:1100:GLU:CD	2.35	0.47
1:A:1623:ASN:ND2	1:A:1627:ARG:HD3	2.28	0.47
1:A:2212:ILE:CG2	1:A:2240:MET:HE3	2.45	0.47
3:C:80:TRP:CH2	3:C:149:LYS:HB3	2.50	0.47
3:C:310:PHE:HE2	3:C:325:ILE:HG21	1.78	0.47
1:A:223:GLY:HA2	1:A:241:PHE:CD1	2.48	0.47
1:A:242:GLY:HA3	1:A:259:SER:HA	1.96	0.47
1:A:245:THR:O	1:A:255:THR:HA	2.14	0.47
1:A:769:LYS:HD3	1:A:808:THR:CA	2.44	0.47
1:A:837:VAL:O	1:A:1520:ALA:HB3	2.15	0.47
1:A:1036:ILE:H	1:A:1036:ILE:HD12	1.79	0.47
1:A:1251:THR:O	1:A:1253:ARG:HG3	2.15	0.47
1:A:1637:ILE:O	1:A:1665:SER:HB2	2.14	0.47
1:A:1819:HIS:O	1:A:1851:MET:HA	2.15	0.47
1:A:1885:THR:HA	1:A:1950:ILE:O	2.14	0.47
2:B:132:GLY:O	2:B:135:LEU:HD13	2.14	0.47
3:C:62:LEU:HD22	3:C:110:GLN:NE2	2.30	0.47
3:C:92:ARG:HG3	3:C:125:THR:HG23	1.96	0.47
1:A:497:ALA:O	1:A:499:ILE:HG13	2.14	0.47
1:A:774:GLY:O	1:A:775:THR:OG1	2.27	0.47
1:A:801:GLY:CA	1:A:838:ALA:HA	2.44	0.47
1:A:964:TYR:CD1	1:A:1243:MET:HB2	2.50	0.47
1:A:1041:LEU:HD21	1:A:1065:TRP:HB3	1.94	0.47
1:A:1201:VAL:O	1:A:1208:THR:HA	2.14	0.47
1:A:2024:LEU:HD12	1:A:2027:LEU:CD2	2.44	0.47
1:A:2226:LYS:HZ1	2:B:124:THR:HG21	1.79	0.47
1:A:2369:ALA:HA	1:A:2396:THR:O	2.13	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
3:C:93:GLY:HA3	3:C:123:PHE:O	2.15	0.47
3:C:161:ALA:HA	3:C:180:PHE:CB	2.43	0.47
1:A:164:ARG:NH1	1:A:1146:ILE:HG21	2.29	0.47
1:A:167:LEU:HD23	1:A:167:LEU:O	2.14	0.47
1:A:375:ASN:HB3	1:A:376:PRO:HD2	1.97	0.47
1:A:422:ALA:HB1	1:A:512:LEU:HD12	1.96	0.47
1:A:455:ALA:H	1:A:509:LYS:HZ1	1.61	0.47
1:A:908:LEU:HB3	1:A:964:TYR:CD1	2.46	0.47
1:A:918:TYR:HB3	1:A:937:ARG:HD2	1.97	0.47
1:A:1661:THR:OG1	1:A:1689:ASN:HB2	2.13	0.47
1:A:1674:TYR:O	1:A:1745:ARG:HG3	2.15	0.47
1:A:1739:SER:OG	1:A:1806:ILE:HD11	2.15	0.47
1:A:1882:ASN:O	1:A:1953:THR:HA	2.15	0.47
1:A:2031:LEU:HD22	1:A:2178:PRO:CB	2.44	0.47
1:A:2297:GLY:HA2	1:A:2323:ILE:O	2.14	0.47
3:C:92:ARG:CD	3:C:126:GLN:HG2	2.45	0.47
3:C:324:TYR:HD1	3:C:339:LYS:HA	1.79	0.47
1:A:348:GLN:HE22	1:A:517:ASN:HB3	1.80	0.47
1:A:407:ILE:HG13	1:A:427:VAL:HG11	1.96	0.47
1:A:475:VAL:O	1:A:475:VAL:HG12	2.14	0.47
1:A:987:PHE:HB2	1:A:1244:THR:HG22	1.95	0.47
1:A:2000:TYR:CE2	1:A:2002:ASP:HB2	2.49	0.47
1:A:207:LEU:HB3	1:A:222:VAL:CG2	2.41	0.47
1:A:227:MET:HE2	1:A:257:VAL:HB	1.97	0.47
1:A:536:ILE:O	1:A:536:ILE:HD12	2.15	0.47
1:A:564:PHE:HD1	1:A:633:LEU:HD22	1.80	0.47
1:A:578:PRO:O	1:A:582:VAL:HG23	2.15	0.47
1:A:1174:TYR:O	1:A:1230:ILE:HG21	2.15	0.47
1:A:1378:GLU:HG3	1:A:1494:ALA:HB2	1.97	0.47
1:A:1677:ALA:HB2	1:A:1745:ARG:HD3	1.96	0.47
1:A:1872:LEU:CB	1:A:1998:THR:HG21	2.45	0.47
1:A:2122:ILE:HG13	1:A:2133:TYR:HB3	1.96	0.47
1:A:2380:ALA:HA	1:A:2385:SER:OG	2.15	0.47
1:A:209:TYR:HE2	1:A:211:PRO:HB3	1.80	0.47
1:A:298:PHE:HE1	1:A:316:VAL:HG11	1.80	0.47
1:A:604:TYR:CE1	1:A:610:VAL:HG11	2.49	0.47
1:A:1082:PRO:CB	1:A:1144:VAL:HG21	2.44	0.47
1:A:1360:LYS:CB	1:A:1424:ASP:HA	2.44	0.47
1:A:1632:THR:HA	1:A:1670:GLU:O	2.14	0.47
1:A:1685:ASN:OD1	1:A:1686:SER:N	2.47	0.47
1:A:1825:LEU:HD12	1:A:1825:LEU:O	2.15	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:202:GLN:NE2	3:C:243:GLU:OE1	2.42	0.46
1:A:225:VAL:HG21	1:A:259:SER:HB3	1.97	0.46
1:A:334:THR:HG22	1:A:339:ASN:HB2	1.98	0.46
1:A:549:ASP:HB3	1:A:550:PRO:CD	2.45	0.46
1:A:820:LEU:CG	1:A:821:PRO:HD2	2.44	0.46
1:A:931:SER:O	1:A:1203:LEU:HD13	2.14	0.46
1:A:938:ILE:H	1:A:938:ILE:HD12	1.80	0.46
1:A:1076:TYR:OH	1:A:1161:ASP:OD2	2.20	0.46
1:A:1198:VAL:CG2	1:A:1211:ALA:HB3	2.45	0.46
1:A:1306:PRO:HD3	1:A:1506:ASN:HD21	1.80	0.46
1:A:1875:THR:C	1:A:1876:ILE:HD12	2.36	0.46
2:B:101:TYR:HA	2:B:169:GLU:O	2.14	0.46
2:B:122:LEU:HD11	2:B:133:ILE:CG2	2.45	0.46
1:A:1345:VAL:O	1:A:1487:MET:HA	2.15	0.46
1:A:1669:VAL:O	1:A:1680:GLU:HA	2.15	0.46
1:A:1735:ILE:HG13	1:A:1764:PHE:HD1	1.81	0.46
1:A:1956:SER:OG	1:A:1984:GLN:NE2	2.48	0.46
1:A:2130:TYR:O	1:A:2134:THR:HG23	2.16	0.46
2:B:48:ARG:NH2	2:B:49:THR:O	2.48	0.46
1:A:222:VAL:HA	1:A:242:GLY:O	2.15	0.46
1:A:530:ILE:HD12	1:A:615:GLY:HA2	1.96	0.46
1:A:817:ALA:HB2	1:A:1529:MET:HG2	1.96	0.46
1:A:925:ILE:O	1:A:925:ILE:HG13	2.16	0.46
1:A:943:LEU:HD21	1:A:1213:TRP:CZ3	2.50	0.46
1:A:1028:LYS:HA	1:A:1179:ILE:O	2.15	0.46
1:A:1855:SER:CB	1:A:1874:ASN:H	2.28	0.46
1:A:1860:SER:O	1:A:1871:ASP:HA	2.15	0.46
1:A:2122:ILE:HD11	1:A:2134:THR:CG2	2.45	0.46
2:B:132:GLY:HA2	2:B:135:LEU:HD13	1.97	0.46
3:C:138:LEU:HD12	3:C:138:LEU:O	2.15	0.46
1:A:291:HIS:HB3	1:A:524:MET:HE2	1.97	0.46
1:A:342:ARG:CG	1:A:2281:ASN:HB3	2.45	0.46
1:A:907:LYS:CB	1:A:970:GLY:HA2	2.46	0.46
1:A:1076:TYR:HB3	1:A:1157:PRO:CG	2.45	0.46
1:A:1146:ILE:O	1:A:1151:ARG:HG2	2.15	0.46
1:A:1479:ASN:OD1	1:A:1480:PHE:N	2.49	0.46
1:A:1601:PRO:HA	1:A:1604:GLN:NE2	2.30	0.46
1:A:1669:VAL:HG12	1:A:1681:ASP:OD1	2.15	0.46
1:A:1840:VAL:HG12	1:A:1888:LEU:HG	1.98	0.46
2:B:39:LEU:HD11	2:B:46:ALA:H	1.80	0.46
3:C:174:TYR:HB2	3:C:382:ASN:CB	2.46	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:175:ILE:H	1:A:175:ILE:HD12	1.79	0.46
1:A:896:SER:OG	1:A:1042:LYS:HG2	2.15	0.46
1:A:965:TYR:CD1	1:A:1249:GLN:HG2	2.51	0.46
1:A:1035:GLU:HG3	1:A:1237:ARG:CD	2.39	0.46
1:A:1364:HIS:HB3	1:A:1504:TRP:HB2	1.96	0.46
1:A:1778:LEU:HD11	1:A:1780:LEU:HG	1.98	0.46
1:A:1962:GLY:O	1:A:1998:THR:N	2.45	0.46
1:A:2348:ALA:CA	1:A:2382:ILE:HD11	2.45	0.46
1:A:2156:LEU:HD23	1:A:2156:LEU:HA	1.78	0.46
3:C:191:THR:H	3:C:195:ASN:HD22	1.63	0.46
3:C:414:SER:O	3:C:417:ILE:HD11	2.16	0.46
1:A:299:ARG:O	1:A:622:LYS:HD3	2.16	0.46
1:A:325:VAL:HG21	1:A:434:LEU:HD11	1.98	0.46
1:A:879:ALA:HA	1:A:991:MET:CE	2.45	0.46
1:A:1440:ILE:HG22	1:A:1441:ASP:CG	2.36	0.46
1:A:1839:PHE:O	1:A:1889:ASN:N	2.48	0.46
1:A:2021:ILE:HB	1:A:2029:VAL:CG2	2.46	0.46
1:A:2240:MET:HE1	1:A:2243:VAL:HG22	1.98	0.46
1:A:2324:LYS:HE2	3:C:106:PHE:CD2	2.51	0.46
3:C:38:PHE:O	3:C:45:VAL:HG22	2.16	0.46
1:A:1120:TYR:HE2	1:A:1122:LEU:HB3	1.79	0.46
1:A:1306:PRO:HG2	1:A:1309:VAL:HG21	1.98	0.46
1:A:1344:ALA:HA	1:A:1489:GLY:HA3	1.98	0.46
1:A:1372:PRO:HD2	1:A:1500:LYS:HE3	1.97	0.46
1:A:1631:TYR:O	1:A:1671:ARG:HA	2.15	0.46
1:A:1666:TYR:HE2	1:A:1668:GLN:HE21	1.64	0.46
1:A:1778:LEU:HD22	1:A:1826:ASN:O	2.16	0.46
1:A:1841:LYS:CD	1:A:1887:THR:HB	2.45	0.46
2:B:149:HIS:CD2	2:B:150:LEU:HG	2.51	0.46
1:A:344:ILE:HD12	1:A:431:ALA:CB	2.46	0.46
1:A:773:GLY:HA3	1:A:803:ASN:H	1.81	0.46
1:A:868:ILE:CG2	1:A:1259:LEU:HB2	2.46	0.46
1:A:907:LYS:HG3	1:A:907:LYS:O	2.15	0.46
1:A:1411:ILE:H	1:A:1411:ILE:HD12	1.79	0.46
1:A:1539:GLY:HA2	1:A:1564:TYR:HA	1.97	0.46
1:A:1687:ALA:HA	1:A:1733:THR:O	2.15	0.46
1:A:1769:GLY:H	1:A:1783:SER:HA	1.81	0.46
1:A:2011:SER:O	1:A:2038:SER:HA	2.15	0.46
1:A:2045:TYR:HA	1:A:2057:LEU:HD23	1.98	0.46
1:A:2205:ASN:ND2	1:A:2251:PRO:HD2	2.30	0.46
3:C:202:GLN:HG3	3:C:390:TYR:CE1	2.51	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
3:C:324:TYR:CD2	3:C:334:LEU:HB3	2.51	0.46
3:C:342:TYR:CE2	3:C:344:THR:HG22	2.51	0.46
1:A:325:VAL:HG22	1:A:460:LEU:CD2	2.46	0.46
1:A:479:GLY:HA3	1:A:2280:ASP:OD1	2.16	0.46
1:A:773:GLY:HA3	1:A:803:ASN:CB	2.46	0.46
1:A:932:LEU:HD12	1:A:932:LEU:O	2.16	0.46
3:C:36:VAL:HG22	3:C:59:PHE:CB	2.45	0.46
3:C:164:LYS:O	3:C:177:ASN:HB3	2.16	0.46
1:A:164:ARG:HH11	1:A:1151:ARG:NH2	2.14	0.45
1:A:177:MET:CE	1:A:179:LEU:HD23	2.46	0.45
1:A:345:ILE:O	1:A:345:ILE:HG22	2.15	0.45
1:A:1346:PHE:HA	1:A:1486:LEU:O	2.16	0.45
3:C:33:ILE:H	3:C:33:ILE:HD12	1.81	0.45
3:C:105:SER:OG	3:C:111:VAL:HA	2.16	0.45
1:A:366:ILE:HD13	1:A:388:TYR:OH	2.17	0.45
1:A:564:PHE:HB2	1:A:565:PRO:CD	2.46	0.45
1:A:2031:LEU:HD13	1:A:2178:PRO:HB3	1.98	0.45
1:A:2035:ARG:HG2	1:A:2067:ILE:HG22	1.97	0.45
2:B:141:GLU:HG3	2:B:170:ILE:O	2.15	0.45
1:A:153:LYS:NZ	1:A:155:ASP:OD1	2.50	0.45
1:A:297:TYR:CB	1:A:381:THR:HG23	2.47	0.45
1:A:626:GLY:O	1:A:655:VAL:HG13	2.16	0.45
1:A:868:ILE:HG22	1:A:1259:LEU:O	2.16	0.45
1:A:1378:GLU:CG	1:A:1494:ALA:HB2	2.46	0.45
1:A:1959:VAL:HG12	1:A:1961:PRO:HD3	1.98	0.45
1:A:2262:SER:C	1:A:2263:LEU:HD12	2.37	0.45
3:C:285:VAL:HG22	3:C:359:PHE:HE2	1.81	0.45
3:C:312:LEU:O	3:C:348:VAL:HG13	2.17	0.45
3:C:321:LYS:HB3	3:C:367:ALA:O	2.16	0.45
1:A:880:SER:H	1:A:991:MET:CE	2.30	0.45
1:A:1362:PHE:C	1:A:1363:LEU:HD12	2.37	0.45
1:A:1587:ASN:OD1	1:A:1588:TYR:N	2.48	0.45
1:A:2275:LEU:HD12	1:A:2284:LEU:HD13	1.98	0.45
1:A:2340:ASP:OD1	1:A:2340:ASP:N	2.48	0.45
3:C:247:ILE:O	3:C:257:ILE:HG21	2.17	0.45
1:A:243:VAL:N	1:A:258:PHE:O	2.35	0.45
1:A:291:HIS:HB3	1:A:524:MET:HE3	1.99	0.45
1:A:296:GLN:HG2	1:A:363:VAL:HA	1.99	0.45
1:A:309:TYR:OH	1:A:585:LEU:HA	2.17	0.45
1:A:405:ARG:HH21	1:A:483:VAL:CG1	2.30	0.45
1:A:868:ILE:HG23	1:A:1259:LEU:HB2	1.99	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1041:LEU:HD21	1:A:1065:TRP:CB	2.47	0.45
1:A:1043:ASP:OD2	1:A:1046:LYS:HB2	2.17	0.45
1:A:1162:ILE:HB	1:A:1238:PHE:CE1	2.51	0.45
1:A:1205:ASN:OD1	1:A:1206:GLY:N	2.48	0.45
1:A:1600:ASP:HB3	1:A:1608:LEU:CD2	2.45	0.45
1:A:1943:THR:OG1	1:A:1944:SER:N	2.46	0.45
1:A:2349:GLY:HA3	1:A:2381:VAL:CG1	2.37	0.45
2:B:106:THR:CG2	2:B:165:VAL:HB	2.46	0.45
2:B:145:PHE:CD1	2:B:167:ILE:HG12	2.51	0.45
3:C:26:GLU:OE1	3:C:26:GLU:N	2.50	0.45
1:A:892:PHE:CZ	1:A:904:LYS:HE2	2.51	0.45
1:A:1075:ILE:CD1	1:A:2347:ALA:HB1	2.46	0.45
1:A:1364:HIS:NE2	1:A:1366:GLU:OE2	2.49	0.45
1:A:2183:LYS:O	1:A:2183:LYS:HD3	2.17	0.45
1:A:2232:THR:O	1:A:2232:THR:HG22	2.17	0.45
1:A:2249:PHE:N	1:A:2271:LYS:O	2.50	0.45
1:A:2267:SER:HA	1:A:2293:ILE:O	2.17	0.45
1:A:2375:HIS:CD2	1:A:2391:ILE:HG12	2.52	0.45
1:A:340:ASN:HB2	1:A:2280:ASP:HB3	1.99	0.45
1:A:990:ILE:O	1:A:1240:ARG:HG3	2.17	0.45
1:A:1559:GLU:HB3	1:A:1595:ILE:HG23	1.99	0.45
1:A:1643:ARG:CD	1:A:1661:THR:HG22	2.47	0.45
1:A:250:GLY:O	1:A:251:ARG:HB2	2.17	0.45
1:A:315:ARG:HB3	1:A:468:VAL:HG13	1.97	0.45
1:A:490:GLY:O	1:A:496:GLN:HG2	2.17	0.45
1:A:507:MET:CE	1:A:510:SER:HB2	2.47	0.45
1:A:630:PHE:CE2	1:A:641:TYR:HB2	2.52	0.45
1:A:831:LEU:CD2	1:A:1527:THR:HG22	2.42	0.45
1:A:1425:LEU:HD23	1:A:1470:LEU:HD12	1.99	0.45
1:A:2156:LEU:HD11	1:A:2210:TYR:CE1	2.52	0.45
3:C:271:ASN:ND2	3:C:364:TYR:OH	2.45	0.45
1:A:364:VAL:HG11	1:A:372:PHE:HZ	1.81	0.45
1:A:992:ARG:HG2	1:A:993:ALA:N	2.32	0.45
1:A:1095:LEU:CD1	1:A:1103:ILE:HD12	2.34	0.45
1:A:1336:GLY:HA3	1:A:1498:ASP:HB3	1.99	0.45
1:A:2253:ILE:HD11	1:A:2269:ILE:HD12	1.98	0.45
3:C:48:ILE:H	3:C:48:ILE:HD12	1.82	0.45
3:C:57:PHE:HE2	3:C:137:ILE:HG13	1.82	0.45
1:A:232:THR:HG22	3:C:418:VAL:CA	2.45	0.45
1:A:351:GLY:O	1:A:386:ASN:ND2	2.50	0.45
1:A:905:ARG:CD	1:A:971:PRO:HG2	2.47	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1626:THR:HA	1:A:1629:ILE:HD13	1.99	0.45
1:A:1806:ILE:H	1:A:1806:ILE:HD12	1.82	0.45
1:A:2244:ASN:C	1:A:2245:LEU:HD12	2.37	0.45
1:A:2287:VAL:O	1:A:2288:LYS:HD3	2.16	0.45
3:C:290:VAL:O	3:C:358:GLY:HA3	2.17	0.45
3:C:417:ILE:H	3:C:417:ILE:HD12	1.82	0.45
1:A:247:LEU:O	1:A:253:THR:HA	2.17	0.44
1:A:827:VAL:HG22	1:A:828:PRO:HD2	1.99	0.44
1:A:1195:ILE:HD13	1:A:1212:ARG:NH2	2.31	0.44
1:A:1682:GLU:HG2	1:A:1682:GLU:O	2.17	0.44
1:A:1834:ILE:H	1:A:1834:ILE:HD12	1.83	0.44
1:A:2017:VAL:H	1:A:2033:MET:HB2	1.81	0.44
2:B:97:ILE:HD11	2:B:120:TYR:HB2	1.97	0.44
3:C:216:GLN:HG3	3:C:227:TYR:CD1	2.52	0.44
3:C:363:GLN:HG3	3:C:365:THR:HG23	1.98	0.44
1:A:182:LYS:CB	1:A:188:GLU:HG2	2.34	0.44
1:A:316:VAL:HG22	1:A:468:VAL:HG22	1.98	0.44
1:A:377:ILE:HG22	1:A:377:ILE:O	2.16	0.44
1:A:962:LEU:HD22	1:A:990:ILE:CD1	2.46	0.44
1:A:1036:ILE:HG13	1:A:1174:TYR:CD1	2.52	0.44
1:A:1121:TYR:O	1:A:1131:ARG:HB3	2.18	0.44
1:A:1181:VAL:HA	1:A:1185:MET:HE1	1.98	0.44
1:A:1568:THR:OG1	1:A:1588:TYR:HB3	2.18	0.44
1:A:1774:LEU:CB	1:A:1778:LEU:HD12	2.34	0.44
1:A:2095:LEU:HD13	1:A:2139:TYR:CE1	2.52	0.44
1:A:1254:PHE:CD1	1:A:1257:LEU:HD12	2.53	0.44
1:A:1437:ALA:HB3	1:A:1474:ILE:HD11	2.00	0.44
1:A:1675:GLU:HG3	1:A:1745:ARG:H	1.82	0.44
1:A:1774:LEU:CG	1:A:1780:LEU:HD12	2.45	0.44
1:A:2115:TYR:HE2	1:A:2144:THR:HG22	1.81	0.44
1:A:2358:THR:HA	1:A:2371:PHE:O	2.16	0.44
3:C:39:VAL:CG2	3:C:56:GLU:HB2	2.46	0.44
3:C:342:TYR:HB2	3:C:349:PHE:HE1	1.83	0.44
1:A:556:ILE:HG23	1:A:654:TYR:CZ	2.52	0.44
1:A:586:ASP:HA	1:A:603:ASP:OD2	2.17	0.44
1:A:773:GLY:CA	1:A:803:ASN:HB2	2.46	0.44
1:A:1374:LEU:CD2	1:A:1499:ILE:HG23	2.46	0.44
1:A:1430:LEU:O	1:A:1433:MET:HG2	2.18	0.44
1:A:1874:ASN:O	1:A:1963:TYR:HB3	2.17	0.44
1:A:2122:ILE:HG13	1:A:2133:TYR:CB	2.48	0.44
1:A:2125:GLU:HA	1:A:2130:TYR:CG	2.53	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2152:LEU:HD21	1:A:2243:VAL:HG21	2.00	0.44
2:B:58:THR:OG1	2:B:141:GLU:HB3	2.16	0.44
3:C:119:PHE:HZ	3:C:135:LEU:HD13	1.83	0.44
1:A:405:ARG:HH21	1:A:483:VAL:HG13	1.83	0.44
1:A:465:GLU:HB2	1:A:478:PHE:HZ	1.83	0.44
1:A:584:ASN:ND2	1:A:628:LEU:HD11	2.32	0.44
1:A:887:ILE:HG13	1:A:887:ILE:O	2.16	0.44
1:A:918:TYR:CB	1:A:937:ARG:HD2	2.48	0.44
1:A:1412:SER:O	1:A:1416:VAL:HG23	2.17	0.44
1:A:2240:MET:CE	1:A:2243:VAL:HG22	2.47	0.44
1:A:1039:ASP:CB	1:A:1168:MET:HE2	2.46	0.44
1:A:1049:GLU:OE1	1:A:1073:SER:HB3	2.18	0.44
1:A:1054:PRO:HD3	1:A:1087:ASN:HD21	1.82	0.44
1:A:1772:PHE:HB3	1:A:1774:LEU:HD23	1.99	0.44
3:C:23:ILE:N	3:C:81:LYS:HG2	2.32	0.44
3:C:80:TRP:CZ2	3:C:149:LYS:HD2	2.53	0.44
3:C:157:CYS:SG	3:C:184:SER:HB2	2.57	0.44
3:C:164:LYS:HD2	3:C:179:ASP:OD2	2.18	0.44
3:C:392:ILE:O	3:C:409:LYS:HA	2.18	0.44
1:A:833:ILE:HG22	1:A:833:ILE:O	2.17	0.44
1:A:1376:ASP:HA	1:A:1401:LYS:HA	1.99	0.44
1:A:1883:THR:HG23	1:A:1953:THR:HG22	2.00	0.44
1:A:1987:VAL:O	1:A:1987:VAL:HG12	2.17	0.44
3:C:348:VAL:HG12	3:C:349:PHE:O	2.17	0.44
1:A:211:PRO:HG2	1:A:217:ILE:O	2.17	0.44
1:A:891:THR:O	1:A:891:THR:HG22	2.17	0.44
1:A:1058:MET:HG2	1:A:1067:ASP:HB3	2.00	0.44
1:A:1494:ALA:CB	1:A:1499:ILE:HD11	2.37	0.44
1:A:2119:ASN:C	1:A:2121:PRO:HD3	2.38	0.44
1:A:2378:SER:O	1:A:2387:PRO:HA	2.18	0.44
3:C:289:PHE:CE1	3:C:329:PHE:HA	2.53	0.44
1:A:961:ASP:O	1:A:962:LEU:HD23	2.18	0.44
3:C:167:ARG:HD3	3:C:228:ASP:OD2	2.17	0.44
1:A:284:LEU:O	1:A:284:LEU:HD13	2.18	0.43
1:A:372:PHE:CD2	1:A:386:ASN:HB2	2.53	0.43
1:A:401:ASN:HB3	1:A:413:GLY:HA2	1.98	0.43
1:A:572:SER:HA	1:A:632:LYS:HZ2	1.81	0.43
1:A:799:ILE:CD1	1:A:840:LEU:HD12	2.48	0.43
1:A:1078:PHE:CE2	1:A:1157:PRO:HA	2.53	0.43
1:A:1393:PHE:O	1:A:1478:PRO:HG3	2.17	0.43
1:A:1872:LEU:HD12	1:A:2003:PHE:CD1	2.53	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2246:VAL:O	1:A:2246:VAL:HG12	2.18	0.43
2:B:60:GLU:HG3	2:B:137:LYS:H	1.83	0.43
3:C:118:PRO:O	3:C:121:ASN:HB3	2.18	0.43
3:C:135:LEU:HD21	3:C:137:ILE:CG1	2.48	0.43
3:C:324:TYR:CD1	3:C:339:LYS:HA	2.53	0.43
1:A:160:SER:OG	1:A:915:PRO:HD2	2.19	0.43
1:A:342:ARG:HH11	1:A:503:LEU:HD13	1.83	0.43
1:A:906:ALA:HB3	1:A:964:TYR:CE1	2.54	0.43
1:A:927:ASN:ND2	1:A:1205:ASN:HA	2.33	0.43
1:A:999:PHE:O	1:A:1003:ASN:N	2.45	0.43
1:A:1338:GLN:HB2	1:A:1341:ASP:HB2	2.00	0.43
1:A:2114:ARG:HD2	1:A:2138:GLY:O	2.18	0.43
1:A:2253:ILE:CG1	1:A:2269:ILE:HD12	2.48	0.43
1:A:2254:ARG:CG	1:A:2268:GLU:HG2	2.39	0.43
2:B:94:ASN:HA	2:B:123:ARG:HH22	1.82	0.43
1:A:288:ASN:O	1:A:290:ARG:N	2.51	0.43
1:A:1570:LEU:HB3	1:A:1572:LEU:HD23	1.99	0.43
1:A:2001:GLN:HG2	1:A:2046:SER:OG	2.18	0.43
1:A:2144:THR:HG21	1:A:2232:THR:HB	2.00	0.43
3:C:141:ASP:C	3:C:142:LYS:HD3	2.37	0.43
3:C:387:GLU:HG3	3:C:415:ILE:CG2	2.47	0.43
1:A:1171:ILE:HG22	1:A:1172:ASN:H	1.82	0.43
1:A:1972:THR:HG22	1:A:1974:LYS:H	1.82	0.43
1:A:2043:GLU:OE1	1:A:2056:PRO:HB3	2.18	0.43
1:A:1016:VAL:HB	1:A:1210:ASN:O	2.18	0.43
1:A:1048:TYR:HD1	1:A:1068:VAL:HG22	1.83	0.43
1:A:1156:LEU:HD23	1:A:2384:THR:CG2	2.48	0.43
1:A:1214:ILE:O	1:A:1214:ILE:HG13	2.19	0.43
3:C:139:ASN:HB3	3:C:145:VAL:HG23	1.99	0.43
1:A:152:THR:HG22	1:A:2390:ASN:HB2	2.00	0.43
1:A:564:PHE:HB2	1:A:565:PRO:HD2	2.00	0.43
1:A:1737:ARG:NH2	1:A:1810:TYR:HA	2.34	0.43
3:C:28:VAL:O	3:C:146:LEU:HA	2.18	0.43
1:A:193:TYR:HA	1:A:203:ASN:HD22	1.83	0.43
1:A:873:ALA:CB	1:A:912:THR:HG23	2.36	0.43
1:A:931:SER:HB3	1:A:1204:PRO:HG2	2.01	0.43
1:A:1079:ASP:O	1:A:1085:ARG:NH2	2.37	0.43
1:A:1198:VAL:HG23	1:A:1211:ALA:H	1.84	0.43
1:A:1358:LYS:HG2	1:A:1426:ALA:CA	2.42	0.43
1:A:1781:ASN:HD21	3:C:402:ARG:NH1	2.17	0.43
1:A:2348:ALA:C	1:A:2382:ILE:HD11	2.38	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
3:C:163:VAL:HG22	3:C:390:TYR:CD2	2.54	0.43
3:C:238:GLU:HG3	3:C:282:TYR:O	2.19	0.43
3:C:314:ALA:CB	3:C:379:ILE:HD11	2.42	0.43
1:A:227:MET:CE	1:A:257:VAL:HB	2.49	0.43
1:A:229:LEU:HG	1:A:229:LEU:O	2.19	0.43
1:A:321:LEU:HD12	1:A:439:TYR:CE2	2.54	0.43
1:A:761:ASN:HB3	1:A:775:THR:HG22	2.00	0.43
1:A:1121:TYR:O	1:A:1131:ARG:HD3	2.19	0.43
1:A:1571:ASN:O	1:A:1573:GLY:N	2.52	0.43
1:A:1739:SER:HB2	1:A:1806:ILE:CG1	2.49	0.43
1:A:1772:PHE:HB3	1:A:1774:LEU:CD2	2.49	0.43
3:C:139:ASN:OD1	3:C:143:GLU:HB2	2.19	0.43
3:C:305:TYR:HD1	3:C:356:LYS:HA	1.83	0.43
1:A:434:LEU:HD22	1:A:438:GLU:OE1	2.18	0.43
1:A:493:SER:O	1:A:1057:VAL:HG12	2.18	0.43
1:A:515:VAL:HG21	1:A:1234:ARG:HH12	1.84	0.43
1:A:1246:PHE:CE2	1:A:1250:MET:HG3	2.54	0.43
1:A:1290:VAL:HG22	1:A:1295:ASN:ND2	2.33	0.43
1:A:1349:VAL:O	1:A:1484:ARG:HA	2.19	0.43
1:A:1595:ILE:HB	1:A:1630:ASP:HB2	2.01	0.43
2:B:31:ASN:HA	2:B:34:GLU:OE1	2.19	0.43
2:B:98:THR:HB	2:B:174:SER:H	1.84	0.43
3:C:166:THR:CG2	3:C:172:ILE:HA	2.49	0.43
3:C:227:TYR:CE2	3:C:230:GLU:HB2	2.53	0.43
3:C:247:ILE:HD11	3:C:357:GLN:HE22	1.84	0.43
1:A:455:ALA:H	1:A:509:LYS:NZ	2.16	0.43
1:A:530:ILE:CG2	1:A:533:ALA:HB2	2.49	0.43
1:A:593:ASP:HB2	1:A:1857:THR:OG1	2.18	0.43
1:A:882:PRO:HG3	1:A:1242:PHE:CE1	2.53	0.43
1:A:943:LEU:HD21	1:A:1213:TRP:CZ2	2.53	0.43
1:A:1688:VAL:O	1:A:1732:ASN:HA	2.19	0.43
1:A:2051:THR:CG2	1:A:2053:GLU:HB2	2.47	0.43
2:B:143:GLN:HA	2:B:168:PHE:O	2.18	0.43
1:A:177:MET:HE3	1:A:179:LEU:HD23	2.00	0.42
1:A:343:ASN:O	1:A:344:ILE:HG13	2.19	0.42
1:A:440:THR:O	1:A:449:SER:HB2	2.19	0.42
1:A:927:ASN:OD1	1:A:1204:PRO:HB2	2.19	0.42
1:A:1033:LEU:CD1	1:A:1236:ILE:HG21	2.48	0.42
1:A:1152:GLY:O	1:A:1153:SER:OG	2.20	0.42
1:A:1179:ILE:HG21	1:A:1216:PHE:HE2	1.84	0.42
1:A:2290:MET:HB3	1:A:2292:TYR:CE1	2.54	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
3:C:210:ILE:HG12	3:C:233:PHE:CE1	2.53	0.42
1:A:225:VAL:CG1	1:A:257:VAL:HG22	2.49	0.42
1:A:226:SER:OG	3:C:281:ASN:HB2	2.18	0.42
1:A:583:PHE:CE1	1:A:629:ILE:HD11	2.55	0.42
1:A:1617:ASP:O	1:A:1621:LYS:N	2.46	0.42
1:A:1678:ASP:OD1	1:A:1679:TYR:N	2.51	0.42
3:C:259:SER:HB2	3:C:264:TYR:CE1	2.53	0.42
3:C:393:LEU:HD23	3:C:409:LYS:CB	2.50	0.42
1:A:154:GLN:HA	1:A:2388:LEU:HD23	2.01	0.42
1:A:868:ILE:HG23	1:A:868:ILE:O	2.19	0.42
1:A:1378:GLU:HB2	1:A:1494:ALA:HB2	2.00	0.42
1:A:1587:ASN:HD21	3:C:217:TYR:HB3	1.85	0.42
1:A:1861:GLU:OE1	1:A:1861:GLU:N	2.53	0.42
1:A:2211:THR:HG1	1:A:2244:ASN:HB2	1.84	0.42
1:A:2356:LYS:HB2	1:A:2374:ASP:OD1	2.19	0.42
3:C:85:ILE:HG23	3:C:86:PRO:HD2	2.02	0.42
3:C:236:GLY:O	3:C:386:THR:HG21	2.19	0.42
3:C:324:TYR:CD2	3:C:334:LEU:HD22	2.46	0.42
3:C:368:ASP:HB3	3:C:372:ASN:HB2	1.99	0.42
1:A:602:PHE:CZ	1:A:617:VAL:HG13	2.55	0.42
1:A:611:ASP:OD2	1:A:618:ILE:HD11	2.19	0.42
1:A:931:SER:HB3	1:A:1204:PRO:HD2	2.01	0.42
1:A:1260:VAL:HG13	1:A:1260:VAL:O	2.19	0.42
1:A:1591:GLY:O	1:A:1633:LYS:HA	2.20	0.42
1:A:1642:VAL:CG1	1:A:1662:PHE:HB2	2.48	0.42
1:A:1693:THR:HG23	1:A:1728:ASN:OD1	2.19	0.42
1:A:2249:PHE:CD1	1:A:2252:LEU:HD23	2.55	0.42
1:A:2350:GLN:N	1:A:2381:VAL:HG21	2.34	0.42
1:A:194:ASP:H	1:A:203:ASN:HD21	1.66	0.42
1:A:234:ILE:O	1:A:234:ILE:HG22	2.20	0.42
1:A:400:LEU:O	1:A:415:ASN:ND2	2.53	0.42
1:A:648:ASN:H	1:A:651:GLN:CG	2.32	0.42
1:A:1522:ILE:O	1:A:1522:ILE:HG22	2.19	0.42
1:A:1957:GLY:N	1:A:1984:GLN:HE22	2.18	0.42
1:A:2030:ASP:OD1	1:A:2030:ASP:N	2.53	0.42
1:A:2156:LEU:HD21	1:A:2210:TYR:CD1	2.54	0.42
1:A:2251:PRO:HB2	1:A:2254:ARG:CB	2.49	0.42
1:A:2255:MET:O	1:A:2255:MET:HG2	2.19	0.42
3:C:105:SER:CB	3:C:112:TYR:H	2.33	0.42
3:C:289:PHE:CE2	3:C:291:VAL:HG23	2.54	0.42
1:A:145:MET:O	1:A:145:MET:HG2	2.19	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:218:GLN:HB2	1:A:246:GLN:HB3	2.02	0.42
1:A:366:ILE:HG22	1:A:369:THR:HG22	2.00	0.42
1:A:392:THR:HG23	1:A:392:THR:O	2.20	0.42
1:A:769:LYS:CD	1:A:808:THR:HG23	2.48	0.42
1:A:813:LEU:HD23	1:A:813:LEU:HA	1.87	0.42
1:A:885:THR:HB	1:A:888:ASN:HD21	1.84	0.42
1:A:1033:LEU:HD23	1:A:1239:MET:HB2	2.01	0.42
1:A:1781:ASN:ND2	3:C:402:ARG:HD2	2.35	0.42
1:A:1829:ILE:O	1:A:1831:ILE:HG12	2.19	0.42
1:A:2001:GLN:HE22	1:A:2049:PRO:CG	2.33	0.42
1:A:2396:THR:C	1:A:2397:LEU:HD12	2.40	0.42
3:C:137:ILE:HG22	3:C:137:ILE:O	2.19	0.42
3:C:288:ASN:HA	3:C:328:ILE:CG2	2.38	0.42
1:A:882:PRO:HB3	1:A:1242:PHE:HZ	1.81	0.42
1:A:962:LEU:HD12	1:A:1254:PHE:HE2	1.84	0.42
1:A:1085:ARG:NH1	1:A:1144:VAL:HG12	2.35	0.42
1:A:1290:VAL:HA	1:A:1295:ASN:HD22	1.85	0.42
1:A:1402:VAL:HG12	1:A:1403:THR:O	2.20	0.42
1:A:1535:VAL:HG13	1:A:1568:THR:HG22	2.01	0.42
1:A:1664:GLN:HG2	1:A:1685:ASN:O	2.20	0.42
2:B:159:THR:HG22	2:B:159:THR:O	2.20	0.42
3:C:92:ARG:HG3	3:C:125:THR:HG22	2.01	0.42
1:A:365:VAL:O	1:A:365:VAL:HG12	2.20	0.42
1:A:429:GLU:HB2	1:A:1167:THR:HG22	2.00	0.42
1:A:627:GLU:HB2	1:A:641:TYR:CZ	2.55	0.42
1:A:1006:TYR:HD1	1:A:1219:PRO:HA	1.85	0.42
1:A:1091:GLY:CA	1:A:1139:GLU:HG2	2.50	0.42
1:A:1197:GLU:HG2	1:A:1212:ARG:HG2	2.02	0.42
1:A:1359:LEU:HD23	1:A:1510:LEU:HD21	1.98	0.42
1:A:1826:ASN:CG	3:C:86:PRO:HG3	2.40	0.42
1:A:1854:ARG:O	1:A:1855:SER:OG	2.35	0.42
2:B:129:TRP:O	2:B:133:ILE:HG22	2.19	0.42
1:A:237:ALA:HB1	1:A:240:LEU:CD2	2.39	0.42
1:A:968:GLU:O	1:A:969:ARG:HB3	2.19	0.42
1:A:1636:SER:CB	1:A:1667:ASN:HD22	2.32	0.42
1:A:1660:PHE:HA	1:A:1689:ASN:O	2.19	0.42
1:A:1728:ASN:O	1:A:1729:ILE:HG13	2.19	0.42
1:A:1960:LEU:HD23	1:A:2007:PHE:HD1	1.83	0.42
1:A:2151:LEU:O	1:A:2155:PHE:N	2.45	0.42
3:C:27:VAL:HG21	3:C:331:ASN:ND2	2.35	0.42
3:C:254:VAL:HG12	3:C:268:LEU:HD21	2.01	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:232:THR:HB	3:C:418:VAL:HG23	2.02	0.42
1:A:988:GLY:O	1:A:1242:PHE:HA	2.20	0.42
1:A:1038:GLU:OE2	1:A:1161:ASP:HA	2.20	0.42
1:A:1353:MET:HE3	1:A:1483:VAL:HG11	2.02	0.42
1:A:1819:HIS:NE2	1:A:1971:GLY:HA2	2.35	0.42
1:A:1171:ILE:HG22	1:A:1172:ASN:N	2.35	0.41
1:A:1344:ALA:HA	1:A:1489:GLY:HA2	2.02	0.41
1:A:2272:ASP:OD1	1:A:2272:ASP:N	2.53	0.41
1:A:2400:ASN:ND2	3:C:249:ALA:HA	2.35	0.41
2:B:45:THR:HG23	2:B:45:THR:O	2.20	0.41
3:C:85:ILE:HG22	3:C:89:ASP:HB3	2.02	0.41
3:C:293:ASN:HB3	3:C:357:GLN:OE1	2.20	0.41
1:A:232:THR:HG23	3:C:419:ASN:OD1	2.20	0.41
1:A:232:THR:CG2	3:C:418:VAL:HG23	2.50	0.41
1:A:315:ARG:HG3	1:A:315:ARG:O	2.19	0.41
1:A:321:LEU:CD1	1:A:323:VAL:HG23	2.51	0.41
1:A:1011:VAL:HG12	1:A:1012:LEU:O	2.20	0.41
1:A:1356:TYR:CE1	1:A:1513:LEU:HB3	2.55	0.41
1:A:2031:LEU:HD22	1:A:2178:PRO:HB3	2.01	0.41
1:A:2213:ASN:HD21	1:A:2244:ASN:HD21	1.68	0.41
1:A:2218:ASN:ND2	1:A:2220:ASP:H	2.19	0.41
1:A:2248:GLN:HB2	1:A:2272:ASP:HB3	2.02	0.41
1:A:2324:LYS:O	1:A:2357:LEU:HA	2.20	0.41
1:A:2337:ARG:NH1	1:A:2344:ASN:HD22	2.18	0.41
1:A:1221:SER:O	1:A:1222:GLN:HG3	2.20	0.41
1:A:1659:ASN:HD21	1:A:1692:TYR:HD1	1.67	0.41
1:A:1662:PHE:O	1:A:1663:SER:OG	2.37	0.41
1:A:1740:ASN:HD22	1:A:1741:ARG:H	1.68	0.41
1:A:1852:TRP:NE1	1:A:1874:ASN:HB3	2.35	0.41
1:A:2044:GLN:O	1:A:2057:LEU:N	2.45	0.41
1:A:2051:THR:HG21	1:A:2053:GLU:OE1	2.19	0.41
1:A:2287:VAL:HG12	1:A:2288:LYS:N	2.35	0.41
2:B:35:ILE:CD1	2:B:145:PHE:HB3	2.33	0.41
1:A:219:LYS:HE3	1:A:221:GLU:OE2	2.20	0.41
1:A:254:ILE:HG22	1:A:254:ILE:O	2.20	0.41
1:A:1587:ASN:ND2	3:C:217:TYR:HB3	2.35	0.41
1:A:1655:TYR:CD2	1:A:1656:ASP:HB3	2.56	0.41
1:A:1776:LYS:O	1:A:1777:SER:OG	2.22	0.41
1:A:1884:LEU:O	1:A:1884:LEU:HD12	2.21	0.41
1:A:285:ASP:HA	1:A:664:GLN:NE2	2.36	0.41
1:A:495:ASN:O	1:A:495:ASN:ND2	2.52	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:805:ASN:HD22	1:A:806:TYR:N	2.18	0.41
1:A:942:GLU:OE2	1:A:1198:VAL:HG11	2.19	0.41
1:A:1129:LEU:HD21	1:A:1251:THR:HG21	2.02	0.41
1:A:2214:GLN:NE2	1:A:2216:ARG:HH21	2.18	0.41
2:B:57:ILE:HD11	2:B:135:LEU:CD2	2.51	0.41
3:C:62:LEU:HD22	3:C:110:GLN:HE21	1.84	0.41
3:C:325:ILE:HD11	3:C:340:MET:SD	2.60	0.41
1:A:364:VAL:HG12	1:A:366:ILE:HG22	2.02	0.41
1:A:458:GLU:O	1:A:509:LYS:HG2	2.20	0.41
1:A:548:THR:HG23	1:A:677:LEU:HD22	2.02	0.41
1:A:769:LYS:HD3	1:A:808:THR:CG2	2.49	0.41
1:A:1041:LEU:HD21	1:A:1065:TRP:CG	2.55	0.41
1:A:1180:ASP:O	1:A:1185:MET:HE1	2.21	0.41
1:A:1284:GLU:CB	1:A:1333:GLY:HA3	2.41	0.41
1:A:1780:LEU:CD2	1:A:1825:LEU:HD22	2.51	0.41
1:A:1864:ASP:OD1	1:A:1865:PRO:HD2	2.21	0.41
1:A:1885:THR:HG22	1:A:1951:ASN:OD1	2.20	0.41
1:A:2032:SER:N	1:A:2178:PRO:O	2.52	0.41
1:A:2353:TRP:O	1:A:2376:SER:HA	2.21	0.41
3:C:39:VAL:HG12	3:C:44:ASN:ND2	2.35	0.41
3:C:89:ASP:OD2	3:C:129:LEU:HD11	2.20	0.41
3:C:174:TYR:HB2	3:C:382:ASN:HB2	2.03	0.41
1:A:334:THR:HG21	1:A:2285:THR:HB	2.01	0.41
1:A:343:ASN:ND2	1:A:429:GLU:HA	2.26	0.41
1:A:907:LYS:HD3	1:A:970:GLY:HA2	2.03	0.41
1:A:1195:ILE:HG23	1:A:1214:ILE:CG2	2.51	0.41
1:A:2295:GLY:O	1:A:2296:LEU:HB2	2.20	0.41
1:A:459:ILE:HG13	1:A:511:ASN:OD1	2.21	0.41
1:A:1371:GLN:OE1	1:A:1500:LYS:NZ	2.28	0.41
1:A:1425:LEU:CD2	1:A:1472:LEU:HD21	2.51	0.41
1:A:1777:SER:HB2	1:A:1828:ASP:CB	2.45	0.41
1:A:1855:SER:OG	1:A:1873:GLY:HA3	2.21	0.41
1:A:1871:ASP:O	1:A:1998:THR:HG23	2.21	0.41
1:A:2067:ILE:HG21	1:A:2173:ARG:O	2.20	0.41
3:C:61:ASP:O	3:C:112:TYR:HB2	2.21	0.41
3:C:304:ASP:O	3:C:357:GLN:HG3	2.20	0.41
1:A:162:ARG:HH12	1:A:919:SER:HB3	1.86	0.41
1:A:411:LYS:HE2	1:A:419:VAL:O	2.20	0.41
1:A:463:ALA:CB	1:A:476:GLY:HA3	2.50	0.41
1:A:536:ILE:O	1:A:612:VAL:HG23	2.21	0.41
1:A:648:ASN:HB2	1:A:651:GLN:NE2	2.36	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:799:ILE:HG12	1:A:840:LEU:HD12	2.02	0.41
1:A:840:LEU:HD23	1:A:841:ARG:N	2.36	0.41
1:A:857:TYR:H	1:A:1509:ARG:CB	2.30	0.41
1:A:879:ALA:HB3	1:A:989:GLY:HA3	2.03	0.41
1:A:938:ILE:HG23	1:A:942:GLU:OE1	2.21	0.41
1:A:943:LEU:O	1:A:1196:ARG:NH1	2.51	0.41
1:A:1038:GLU:OE2	1:A:1162:ILE:N	2.54	0.41
1:A:1174:TYR:HB2	1:A:1227:ILE:HB	2.02	0.41
1:A:1617:ASP:O	1:A:1620:GLU:N	2.52	0.41
1:A:1666:TYR:HB3	1:A:1684:SER:HA	2.03	0.41
1:A:1805:ASN:HD22	1:A:1806:ILE:N	2.18	0.41
1:A:1872:LEU:HB3	1:A:1998:THR:HG21	2.03	0.41
1:A:2031:LEU:HD22	1:A:2178:PRO:HB2	2.03	0.41
1:A:2224:SER:OG	1:A:2225:PRO:HD2	2.21	0.41
1:A:2331:ASN:HA	1:A:2350:GLN:O	2.21	0.41
1:A:2355:LEU:HG	1:A:2355:LEU:O	2.21	0.41
3:C:103:SER:OG	3:C:301:ILE:HG21	2.21	0.41
1:A:910:TRP:H	1:A:1136:ASN:ND2	2.16	0.41
1:A:1195:ILE:HG21	1:A:1212:ARG:NH2	2.36	0.41
1:A:1295:ASN:O	1:A:1303:TYR:HB3	2.21	0.41
1:A:1344:ALA:HB1	1:A:1487:MET:CG	2.51	0.41
1:A:1528:ASN:HA	1:A:1533:ALA:O	2.21	0.41
1:A:2301:LYS:HB2	1:A:2320:ASP:OD1	2.21	0.41
3:C:80:TRP:CH2	3:C:149:LYS:HD2	2.56	0.41
3:C:103:SER:CB	3:C:301:ILE:HG21	2.50	0.41
3:C:137:ILE:HG23	3:C:137:ILE:HD12	1.75	0.41
3:C:198:VAL:HG21	3:C:225:TYR:CE2	2.56	0.41
1:A:1882:ASN:HB2	1:A:1954:LYS:HB2	2.03	0.40
1:A:2065:PHE:HE2	1:A:2210:TYR:HD2	1.68	0.40
1:A:298:PHE:CE1	1:A:316:VAL:HG11	2.56	0.40
1:A:498:ILE:HD13	1:A:2341:TYR:CZ	2.56	0.40
1:A:994:LEU:CD1	1:A:1239:MET:H	2.34	0.40
1:A:1018:ASN:HD22	1:A:1209:THR:CG2	2.33	0.40
1:A:1393:PHE:CZ	1:A:1475:LYS:HB2	2.57	0.40
3:C:181:THR:CG2	3:C:224:VAL:HG22	2.52	0.40
1:A:173:GLN:HB3	1:A:175:ILE:HD12	2.03	0.40
1:A:218:GLN:HE21	1:A:248:GLN:CB	2.35	0.40
1:A:454:LEU:HB3	1:A:509:LYS:NZ	2.36	0.40
1:A:463:ALA:HB1	1:A:476:GLY:HA3	2.03	0.40
1:A:492:ASN:HB3	1:A:495:ASN:CB	2.50	0.40
1:A:619:PHE:HD2	1:A:624:PRO:CG	2.33	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:820:LEU:CD1	1:A:821:PRO:HD2	2.52	0.40
1:A:1012:LEU:HD11	1:A:1213:TRP:CZ2	2.57	0.40
1:A:1090:VAL:HB	1:A:1096:PRO:HA	2.03	0.40
1:A:1879:SER:HA	1:A:1956:SER:O	2.21	0.40
1:A:2147:ASN:O	1:A:2148:GLN:HB3	2.20	0.40
1:A:372:PHE:O	1:A:386:ASN:HA	2.20	0.40
1:A:810:VAL:HG13	1:A:810:VAL:O	2.20	0.40
1:A:918:TYR:CG	1:A:937:ARG:HD2	2.56	0.40
1:A:1182:LYS:H	1:A:1185:MET:HE3	1.85	0.40
1:A:1972:THR:O	1:A:1980:VAL:HG11	2.21	0.40
1:A:2300:PHE:HB3	1:A:2321:ILE:CG2	2.52	0.40
1:A:2392:ARG:O	1:A:2393:SER:OG	2.36	0.40
2:B:104:TYR:HB2	2:B:109:LYS:O	2.21	0.40
1:A:143:VAL:HG12	1:A:175:ILE:HA	2.04	0.40
1:A:209:TYR:CD2	1:A:211:PRO:HD3	2.56	0.40
1:A:507:MET:HE3	1:A:510:SER:HB2	2.04	0.40
1:A:648:ASN:O	1:A:649:ALA:HB3	2.22	0.40
1:A:875:ALA:HB3	1:A:992:ARG:NH1	2.36	0.40
1:A:994:LEU:HD11	1:A:1239:MET:HB2	2.04	0.40
1:A:1052:LEU:HD22	1:A:1058:MET:HE2	2.02	0.40
1:A:1693:THR:HA	1:A:1728:ASN:HA	2.04	0.40
1:A:2322:ASN:HB3	1:A:2360:ASP:HB3	2.04	0.40
2:B:123:ARG:HA	2:B:130:LYS:HD3	2.02	0.40
3:C:154:GLU:OE2	3:C:156:HIS:NE2	2.54	0.40
3:C:157:CYS:HA	3:C:184:SER:HB2	2.04	0.40
3:C:198:VAL:HG12	3:C:200:LEU:HD12	2.04	0.40

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles [i](#)

5.3.1 Protein backbone [i](#)

In the following table, the Percentiles column shows the percent Ramachandran outliers of the chain as a percentile score with respect to all PDB entries followed by that with respect to all EM entries.

The Analysed column shows the number of residues for which the backbone conformation was analysed, and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	1952/2403 (81%)	1453 (74%)	498 (26%)	1 (0%)	51	83
2	B	122/176 (69%)	102 (84%)	20 (16%)	0	100	100
3	C	395/419 (94%)	326 (82%)	69 (18%)	0	100	100
All	All	2469/2998 (82%)	1881 (76%)	587 (24%)	1 (0%)	100	100

All (1) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	374	ASN

5.3.2 Protein sidechains [i](#)

In the following table, the Percentiles column shows the percent sidechain outliers of the chain as a percentile score with respect to all PDB entries followed by that with respect to all EM entries.

The Analysed column shows the number of residues for which the sidechain conformation was analysed, and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	1757/2115 (83%)	1722 (98%)	35 (2%)	55	74
2	B	107/151 (71%)	106 (99%)	1 (1%)	78	88
3	C	356/375 (95%)	353 (99%)	3 (1%)	81	89
All	All	2220/2641 (84%)	2181 (98%)	39 (2%)	61	77

All (39) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	145	MET
1	A	495	ASN
1	A	537	LYS
1	A	650	ASN
1	A	657	ARG
1	A	674	ASN
1	A	805	ASN
1	A	897	ASN
1	A	933	ASN
1	A	969	ARG
1	A	1084	ASN
1	A	1123	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1150	ASN
1	A	1394	TYR
1	A	1509	ARG
1	A	1623	ASN
1	A	1625	ARG
1	A	1740	ASN
1	A	1772	PHE
1	A	1787	ASN
1	A	1805	ASN
1	A	1841	LYS
1	A	1889	ASN
1	A	2028	LYS
1	A	2035	ARG
1	A	2052	ASN
1	A	2064	MET
1	A	2136	ASN
1	A	2185	ASN
1	A	2189	ARG
1	A	2196	LYS
1	A	2199	ARG
1	A	2218	ASN
1	A	2255	MET
1	A	2356	LYS
2	B	42	ASN
3	C	41	ASN
3	C	98	ARG
3	C	261	ASN

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (78) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	203	ASN
1	A	218	GLN
1	A	248	GLN
1	A	288	ASN
1	A	300	ASN
1	A	317	GLN
1	A	340	ASN
1	A	343	ASN
1	A	348	GLN
1	A	375	ASN
1	A	444	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	495	ASN
1	A	674	ASN
1	A	805	ASN
1	A	865	GLN
1	A	888	ASN
1	A	890	ASN
1	A	897	ASN
1	A	1001	GLN
1	A	1008	GLN
1	A	1018	ASN
1	A	1072	GLN
1	A	1084	ASN
1	A	1087	ASN
1	A	1136	ASN
1	A	1150	ASN
1	A	1190	ASN
1	A	1210	ASN
1	A	1224	GLN
1	A	1295	ASN
1	A	1340	GLN
1	A	1506	ASN
1	A	1562	GLN
1	A	1587	ASN
1	A	1604	GLN
1	A	1623	ASN
1	A	1667	ASN
1	A	1740	ASN
1	A	1767	GLN
1	A	1781	ASN
1	A	1787	ASN
1	A	1805	ASN
1	A	1819	HIS
1	A	1821	GLN
1	A	1826	ASN
1	A	1853	GLN
1	A	1874	ASN
1	A	1880	ASN
1	A	1889	ASN
1	A	1984	GLN
1	A	2001	GLN
1	A	2020	ASN
1	A	2052	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	2083	GLN
1	A	2120	ASN
1	A	2148	GLN
1	A	2205	ASN
1	A	2213	ASN
1	A	2214	GLN
1	A	2218	ASN
1	A	2242	ASN
1	A	2332	ASN
1	A	2375	HIS
1	A	2400	ASN
2	B	42	ASN
2	B	90	HIS
3	C	41	ASN
3	C	44	ASN
3	C	104	ASN
3	C	110	GLN
3	C	126	GLN
3	C	195	ASN
3	C	216	GLN
3	C	232	GLN
3	C	261	ASN
3	C	271	ASN
3	C	357	GLN
3	C	385	GLN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

5.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains [i](#)

There are no non-standard protein/DNA/RNA residues in this entry.

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no monosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

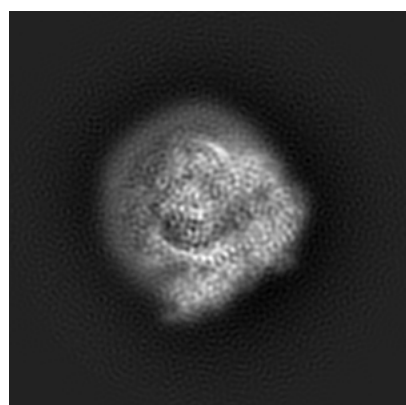
6 Map visualisation [i](#)

This section contains visualisations of the EMDB entry EMD-0134. These allow visual inspection of the internal detail of the map and identification of artifacts.

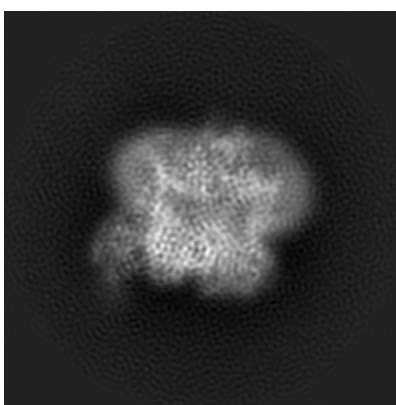
No raw map or half-maps were deposited for this entry and therefore no images, graphs, etc. pertaining to the raw map can be shown.

6.1 Orthogonal projections [i](#)

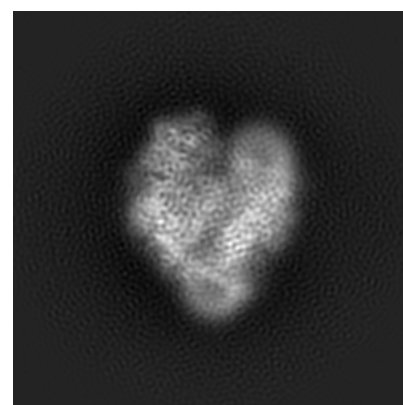
6.1.1 Primary map



X



Y

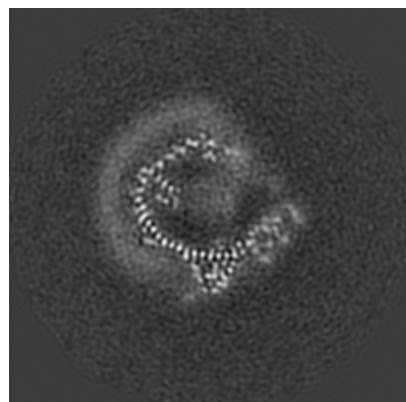


Z

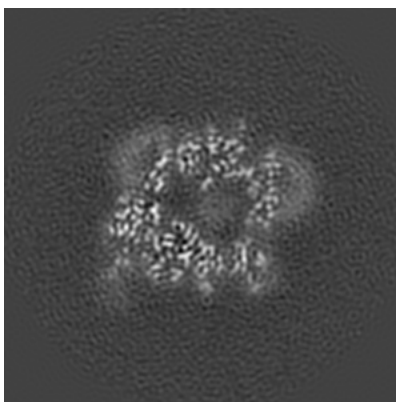
The images above show the map projected in three orthogonal directions.

6.2 Central slices [i](#)

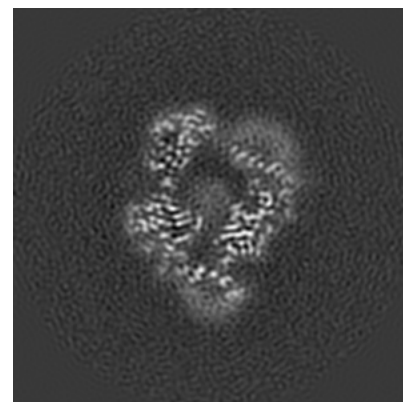
6.2.1 Primary map



X Index: 150



Y Index: 150

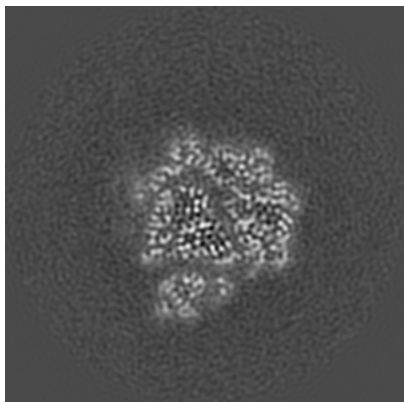


Z Index: 150

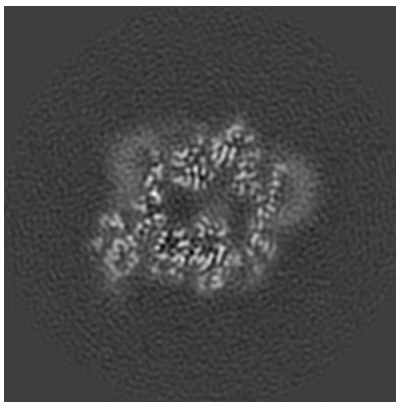
The images above show central slices of the map in three orthogonal directions.

6.3 Largest variance slices [i](#)

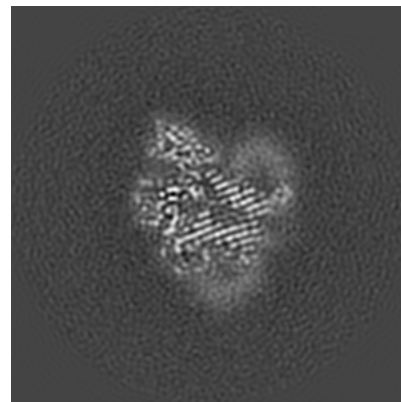
6.3.1 Primary map



X Index: 120



Y Index: 141

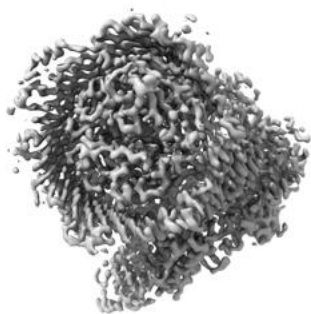


Z Index: 118

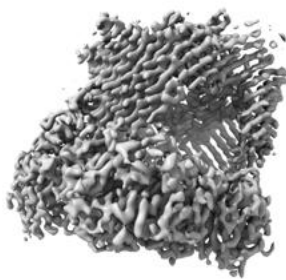
The images above show the largest variance slices of the map in three orthogonal directions.

6.4 Orthogonal surface views [i](#)

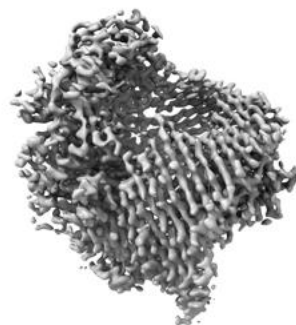
6.4.1 Primary map



X



Y



Z

The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 0.0874. These images, in conjunction with the slice images, may facilitate assessment of whether an appropriate contour level has been provided.

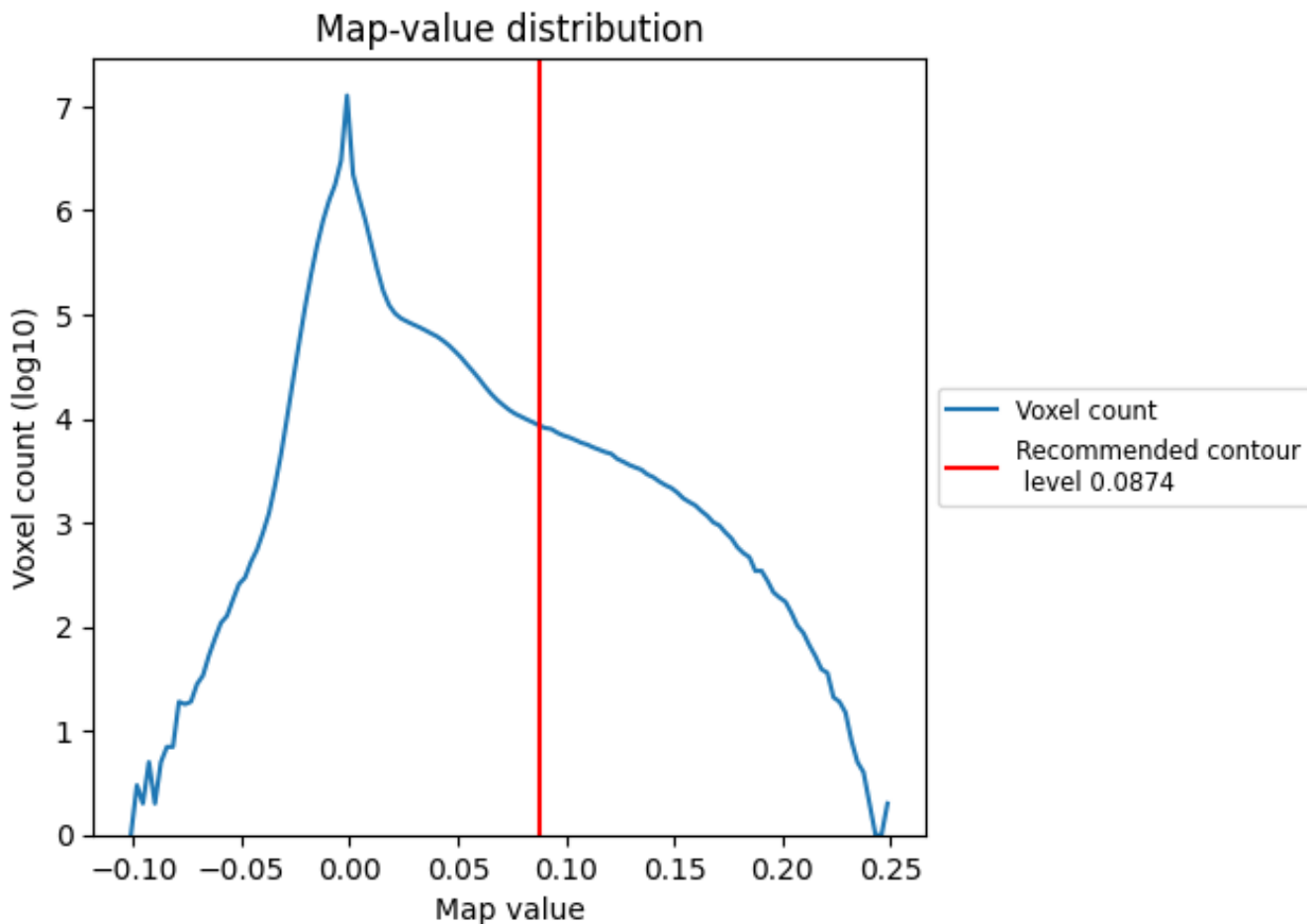
6.5 Mask visualisation

This section was not generated. No masks/segmentation were deposited.

7 Map analysis [i](#)

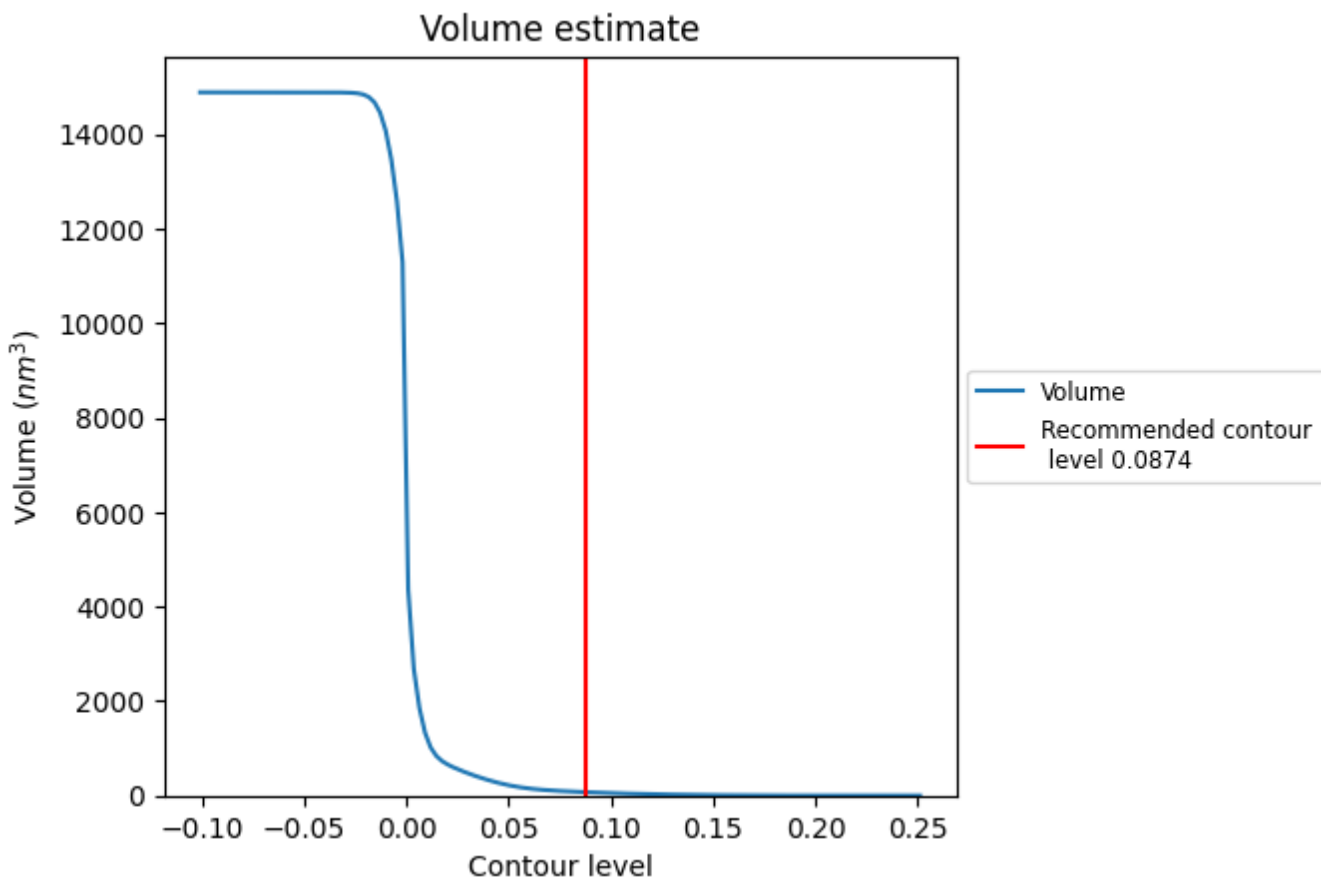
This section contains the results of statistical analysis of the map.

7.1 Map-value distribution [i](#)



The map-value distribution is plotted in 128 intervals along the x-axis. The y-axis is logarithmic. A spike in this graph at zero usually indicates that the volume has been masked.

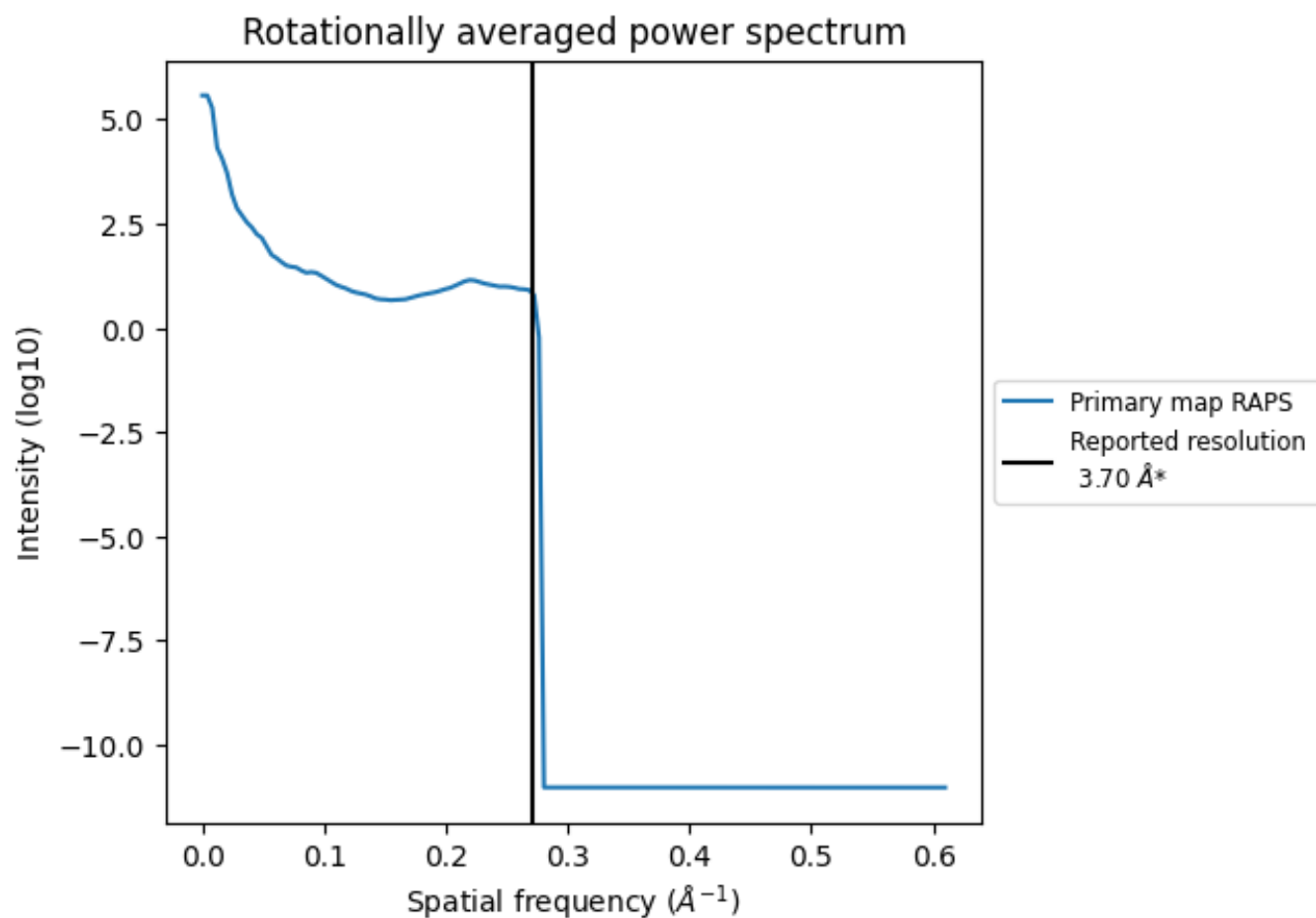
7.2 Volume estimate [i](#)



The volume at the recommended contour level is 72 nm^3 ; this corresponds to an approximate mass of 65 kDa.

The volume estimate graph shows how the enclosed volume varies with the contour level. The recommended contour level is shown as a vertical line and the intersection between the line and the curve gives the volume of the enclosed surface at the given level.

7.3 Rotationally averaged power spectrum [\(i\)](#)

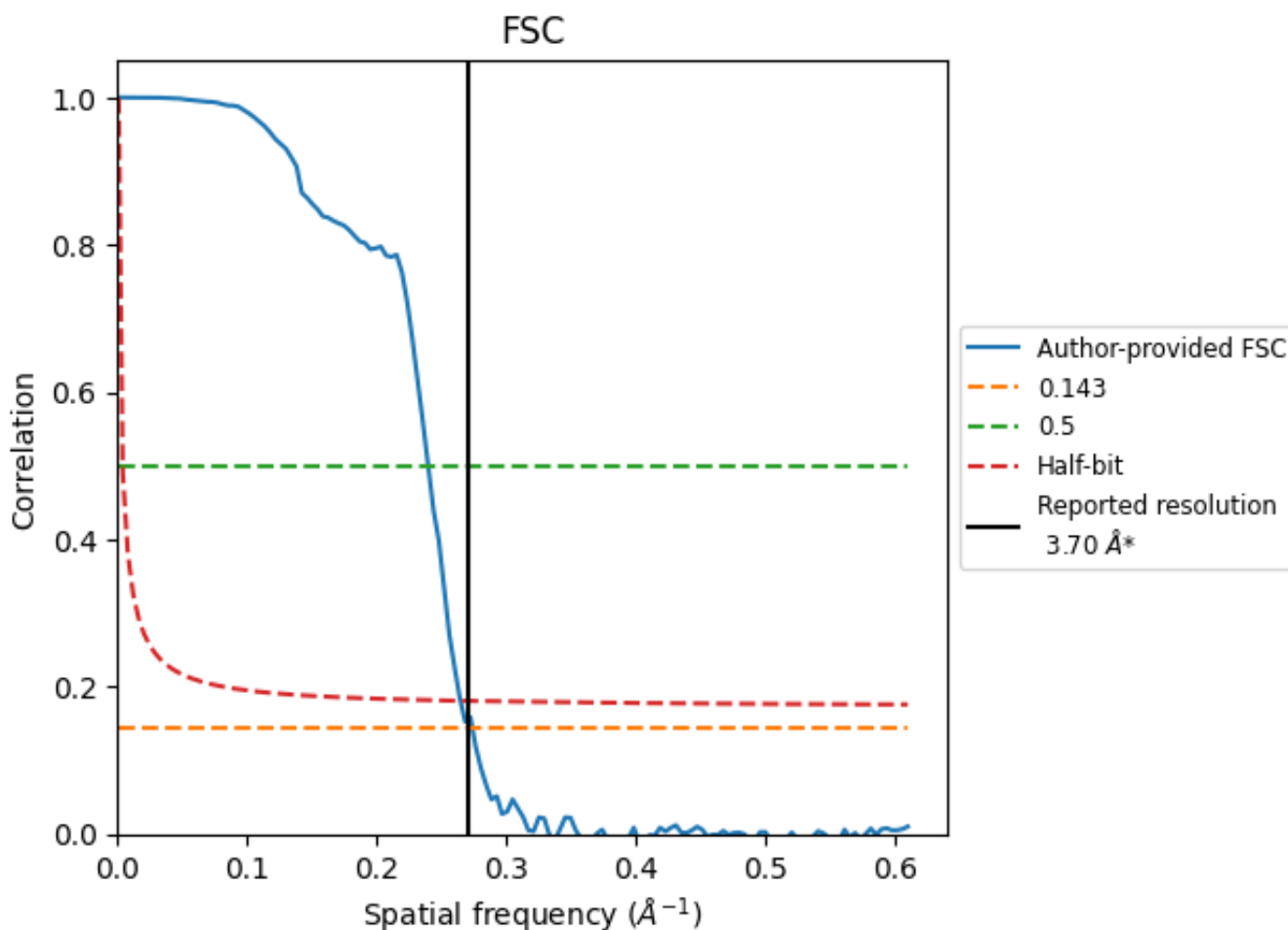


*Reported resolution corresponds to spatial frequency of 0.270 Å⁻¹

8 Fourier-Shell correlation [i](#)

Fourier-Shell Correlation (FSC) is the most commonly used method to estimate the resolution of single-particle and subtomogram-averaged maps. The shape of the curve depends on the imposed symmetry, mask and whether or not the two 3D reconstructions used were processed from a common reference. The reported resolution is shown as a black line. A curve is displayed for the half-bit criterion in addition to lines showing the 0.143 gold standard cut-off and 0.5 cut-off.

8.1 FSC [i](#)



*Reported resolution corresponds to spatial frequency of 0.270 Å⁻¹

8.2 Resolution estimates [i](#)

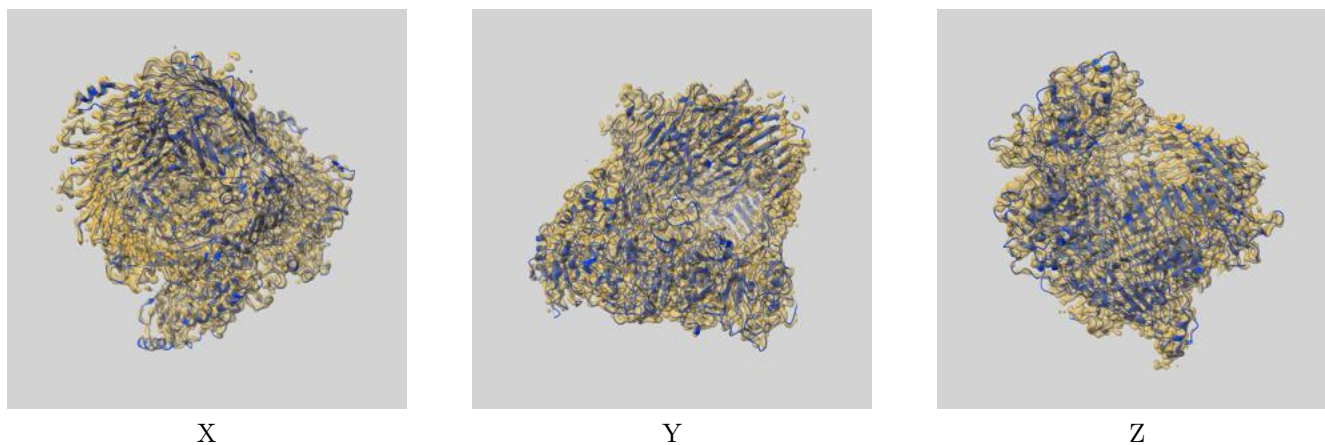
Resolution estimate (Å)	Estimation criterion (FSC cut-off)		
	0.143	0.5	Half-bit
Reported by author	3.70	-	-
Author-provided FSC curve	3.65	4.17	3.78
Unmasked-calculated*	-	-	-

*Resolution estimate based on FSC curve calculated by comparison of deposited half-maps.

9 Map-model fit [i](#)

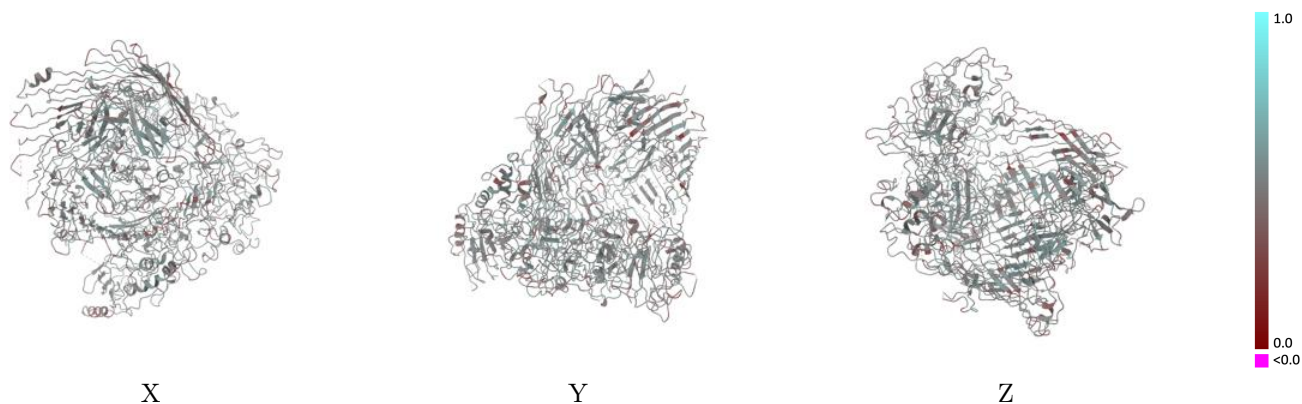
This section contains information regarding the fit between EMDB map EMD-0134 and PDB model 6H3J. Per-residue inclusion information can be found in section 3 on page 4.

9.1 Map-model overlay [i](#)



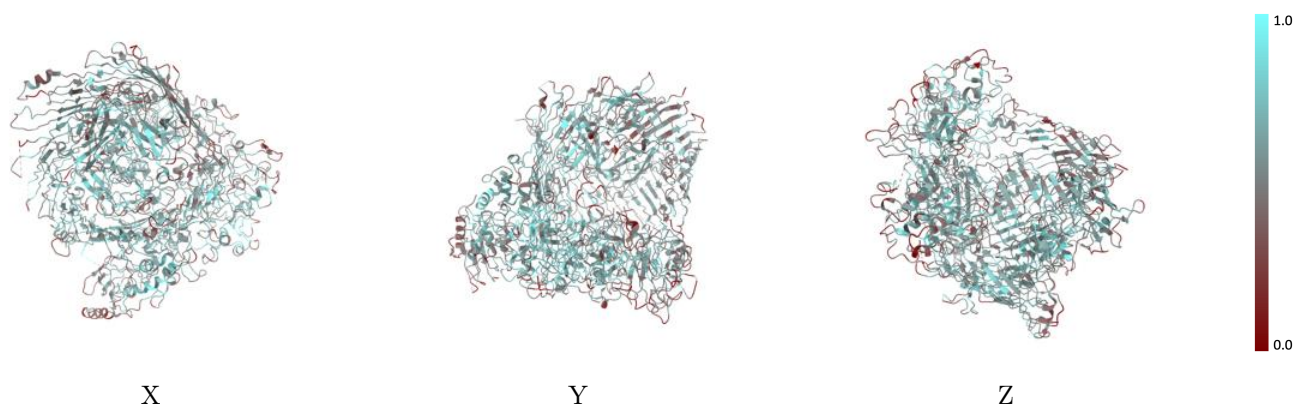
The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 0.0874 at 50% transparency in yellow overlaid with a ribbon representation of the model coloured in blue. These images allow for the visual assessment of the quality of fit between the atomic model and the map.

9.2 Q-score mapped to coordinate model [i](#)



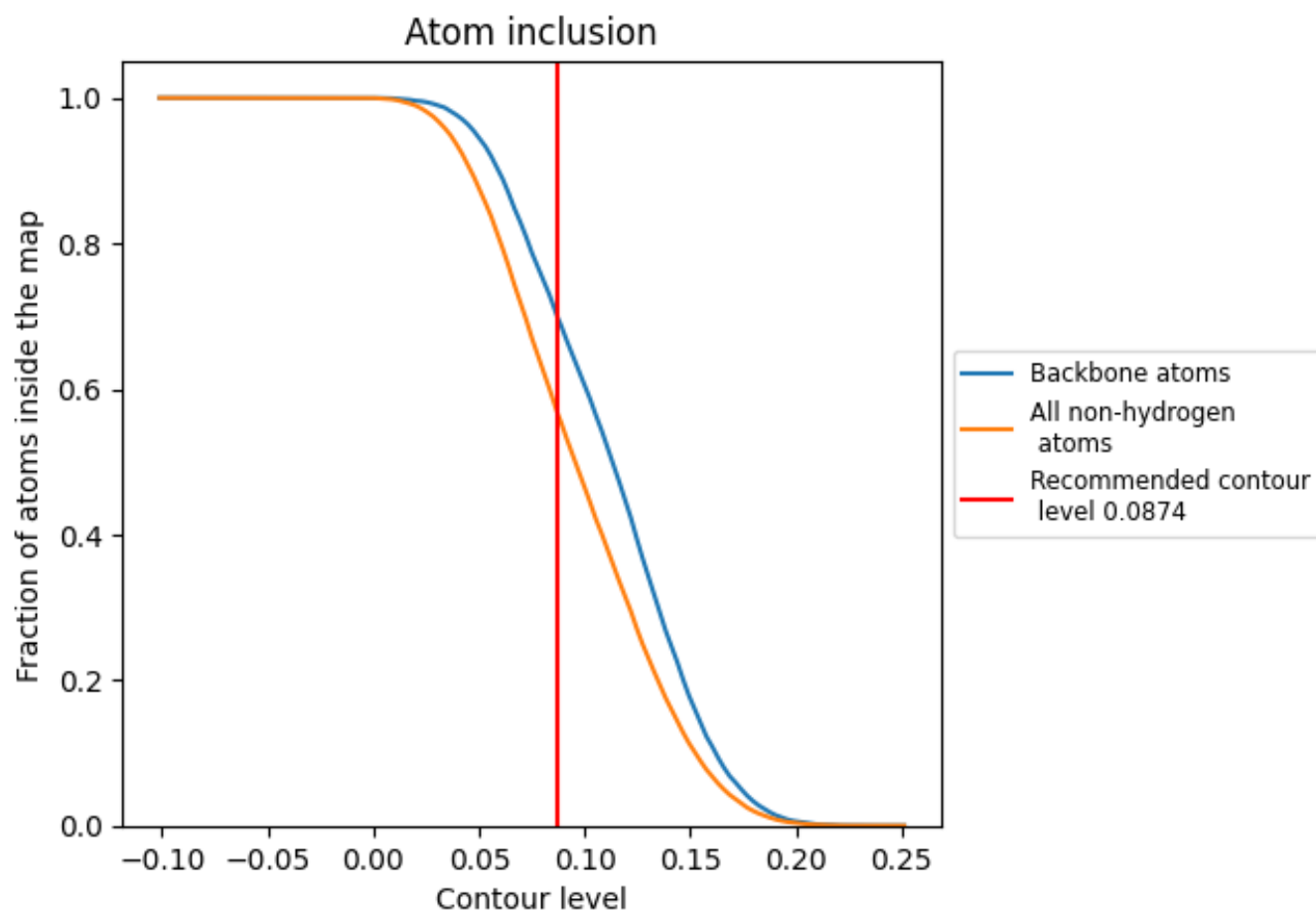
The images above show the model with each residue coloured according to its Q-score. This shows their resolvability in the map with higher Q-score values reflecting better resolvability. Please note: Q-score is calculating the resolvability of atoms, and thus high values are only expected at resolutions at which atoms can be resolved. Low Q-score values may therefore be expected for many entries.

9.3 Atom inclusion mapped to coordinate model [i](#)



The images above show the model with each residue coloured according to its atom inclusion. This shows to what extent they are inside the map at the recommended contour level (0.0874).









9.4 Atom inclusion [i](#)



At the recommended contour level, 70% of all backbone atoms, 57% of all non-hydrogen atoms, are inside the map.

9.5 Map-model fit summary [i](#)

The table lists the average atom inclusion at the recommended contour level (0.0874) and Q-score for the entire model and for each chain.

Chain	Atom inclusion	Q-score
All	 0.5651	 0.4810
A	 0.5660	 0.4790
B	 0.4260	 0.4630
C	 0.6017	 0.4970

